

FACULTAD DE MATEMÁTICAS



Estabilidad de órbitas periódicas en el sistema molecular KCN

Daniel Coronado Núñez

Directores: Emilio Freire Macías
y Jorge Galán Vioque

Departamento de Matemática Aplicada II

Trabajo de Fin de Máster
Máster Universitario en Matemáticas
Sevilla, 2020

Resumen

En este trabajo se estudia la estabilidad de soluciones periódicas de un sistema dinámico hamiltoniano, la molécula KCN, por el método de continuación numérica, mediante el software AUTO. Por la elevada complejidad que presenta la estructura de su espacio de fases, se trata de un problema de interés desde el punto de vista matemático. A través de los multiplicadores de Floquet, que toman una forma particular en este tipo de sistemas, pueden dilucidarse las bifurcaciones de estas familias de soluciones periódicas, a medida que cambia la energía del sistema. Por este motivo, junto con la sección de Poincaré son potentes herramientas para el estudio de los sistemas dinámicos. Como resultados principales se obtienen: una parte del diagrama de bifurcaciones del sistema, caracterizando todos los puntos de bifurcación entre las ramas de soluciones periódicas encontradas, y una estrecha relación entre la molécula KCN y el sistema mecánico de péndulo-muelle, al que lleva implícito en su potencial. Estos resultados son el inicio de posibles desarrollos posteriores para la búsqueda del diagrama de bifurcaciones completo, lo que arrojaría luz sobre la relación entre el comportamiento de multiplicadores de Floquet en las ramas calculadas y las secciones de Poincaré ya conocidas del sistema, y sobre el estudio de bifurcaciones de distinto tipo a partir de las que aparecen en el péndulo-muelle.

Abstract

This paper addresses the stability of periodic solutions in a Hamiltonian dynamical system -the KCN molecule-, by applying the method of numerical continuation through the AUTO software. From a mathematical perspective, this problem is pertinent due to the high complexity of the structure of the phase space. When the energy changes, bifurcation families can be derived through the Floquet multipliers, which present some particular features in this kind of system. Along with the Poincaré section, they are both powerful tools for studying dynamical systems. Our results evidence a partial bifurcation diagram of the system, and a narrow relationship between the KCN and the spring-pendulum, which is implicitly within the potential of the KCN. These findings could open new subsequent research to explore the complete bifurcation diagram that would contribute to casting some light on already-known Poincaré sections. The results could also help to advance in the study of bifurcations different from those implicit in the spring-pendulum.

Índice general

Introducción	1
1. Estabilidad de órbitas periódicas en sistemas dinámicos	5
1.1. Sección de Poincaré	5
1.2. Linealización de sistemas periódicos no lineales	7
1.3. Teoría de Floquet	7
2. Sistemas dinámicos hamiltonianos	13
2.1. Mecánica Hamiltoniana	13
2.1.1. Formalismo	13
2.1.2. Propiedad simpléctica	14
2.1.3. Matriz hamiltoniana y teorema de Liouville	15
2.1.4. Constantes de movimiento	15
2.2. Sistemas integrables y no integrables	16
2.2.1. Sistemas integrables: toro invariante y órbitas periódicas	16
2.2.2. Sistemas no integrables: estructura KAM	17
2.3. Sección de Poincaré en sistemas con 2 grados de libertad	18
3. Estabilidad de OP en sistemas hamiltonianos	21
3.1. Ecuaciones variacionales de Poincaré	21
3.2. Teorema de Lyapunov-Poincaré	22
3.3. Bifurcaciones de órbitas periódicas con 2 grados de libertad	23
4. Continuación numérica de soluciones	25
4.1. Teoría de la continuación numérica	25
4.2. Métodos de continuación de soluciones	26
4.2.1. Continuación de parámetros	27
4.2.2. Continuación por pseudo-longitud de arco de Keller	27
4.3. Resolución de problemas de valor en la frontera	28
4.4. Continuación de órbitas periódicas	31
4.5. Continuación de órbitas periódicas en sistemas hamiltonianos	32
5. Software de continuación AUTO	35
5.1. Objetivos del software	35
5.2. Archivos de entrada y ejecución	36
5.2.1. Archivo xxx.f90	36
5.2.2. Archivo c.xxx	36
5.2.3. Archivo xxx.auto y ejecución	39
5.3. Salidas del software	40

6. Dinámica vibracional de la molécula KCN	41
6.1. Descripción hamiltoniana	41
6.2. Sección de Poincaré y la configuración lineal CN-K	43
6.3. Relación con el péndulo-muelle	45
6.4. Unidades empleadas	46
7. Estudio numérico de bifurcaciones en el sistema KCN	47
7.1. Resultados de la continuación numérica con AUTO	47
7.1.1. Diagrama de bifurcaciones	47
7.1.2. Rama 1	49
7.1.3. Rama 2	52
7.1.4. Rama 2.1	54
7.1.5. Rama 3	56
7.2. Visualización del espacio de fases con la sección de Poincaré	57
7.3. Discusión de resultados	60
8. Conclusiones y posibles ampliaciones	63

Introducción

*La mecánica es el paraíso de las ciencias matemáticas,
porque con ella se alcanza el fruto matemático.
Es la más noble de las ciencias puesto que vemos que por medio de ella
realizan sus acciones todos los cuerpos animados que poseen movimiento*

*La meccanica è il paradiso delle scienze matematiche,
perché con essa si ottiene il frutto matematico.
È la più nobile di tutte le scienze perché vediamo che attraverso di essa
svolgono le loro azioni tutti i corpi animati che possiedono movimento.*

Leonardo da Vinci,
Tratado de Estática y Mecánica (Códice I Madrid), 1493.

Los sistemas dinámicos son un formalismo matemático que tienen como aplicación directa la descripción de la naturaleza. Consiguen recoger el concepto científico fundamental de proceso determinista: dadas las mismas condiciones iniciales, el sistema evoluciona siempre de la misma forma. Además, la repetición de situaciones idénticas es la base del método científico y de la experimentación. Los sistemas dinámicos que describen el movimiento de los elementos de la naturaleza son muy particulares, debido a la existencia de una magnitud muy especial, la energía. La energía se entiende como la capacidad que posee un sistema para originar cambios en sí mismo y en su entorno, generados a través del movimiento. Formalmente, la energía se define como una cantidad matemática que se mantiene constante durante la evolución del sistema. Por este motivo, estos sistemas son *conservativos* [1, 2].

El formalismo que describe los sistemas conservativos en Física es la Mecánica Clásica, que inició Newton y continuó desarrollándose por destacados científicos como Euler, Lagrange, Hamilton y Poincaré. La Mecánica Clásica engloba una serie de formalismos diferentes que describen el movimiento de los elementos en la naturaleza, cada uno con mayor o menor complejidad, pero siempre obteniendo el mismo resultado. El más empleado es el formalismo hamiltoniano, debido a la simetría de sus ecuaciones y que, al contrario del resto de formalismos, éstas son de primer orden. Esencialmente todos los formalismos de la Mecánica buscan una respuesta a la cuestión existencial: *¿Por qué ocurre el movimiento en la naturaleza?*

Los sistemas hamiltonianos son sistemas dinámicos no genéricos con propiedades peculiares, sobre todo con respecto a sus soluciones periódicas, es decir, aquellas que transcurrido cierto tiempo retornan a su punto inicial. Poincaré reconoció por primera vez su importancia en *Methodes*

Nouvelles de la Mécanique Celeste, en 1899. Da cuenta que en los sistemas no integrables, aquellos en los que no se obtiene una solución analítica y deben estudiarse empleando otros métodos, como el Sistema Solar, es muy complicado encontrar órbitas puramente periódicas, y que éste es inestable. Por esta razón se refiere a este tipo de sistemas como *fortaleza*:

Parece en principio que la existencia de soluciones periódicas no tiene ningún interés práctico. De hecho, la probabilidad es cero de que la condición inicial se corresponda exactamente con las de una solución periódica ... lo que proporciona a estas órbitas periódicas su valor es que ofrecen, por decirlo de alguna manera, el único camino por el cuál penetrar en esta fortaleza que tiene la reputación de ser inexpugnable...

Entorno a esas familias y sus bifurcaciones Poincaré forma el esqueleto de los sistemas dinámicos hamiltonianos y se puede tratar de comprender la complejidad de las soluciones.

En este trabajo el elemento de la naturaleza que se pretende describir empleando el formalismo hamiltoniano es una molécula, concretamente, su dinámica vibracional. Una molécula es un sistema físico en el que un conjunto de átomos están unidos por fuerzas. Los átomos son los constituyentes fundamentales de la materia a nivel químico. Éstos pueden unirse formando moléculas, y las vibraciones son las oscilaciones de su posición, inducidas por los enlaces con los demás átomos que la conforman. Esta dinámica vibracional consiste en un sistema hamiltoniano no integrable, por lo que encontrar y estudiar órbitas periódicas es un problema de enorme interés desde el punto de vista matemático.

Nuestro objetivo es estudiar las soluciones periódicas, dentro de la *fortaleza* a la que se refería Poincaré, a través de los multiplicadores de Floquet. Para ello, se ha llevado a cabo una recopilación sobre la teoría clásica de estabilidad de sistemas dinámicos no lineales para entender por qué junto con la sección de Poincaré son dos herramientas fundamentales en el estudio de la estabilidad de las soluciones periódicas. Cuando se particulariza la teoría de estabilidad para los sistemas hamiltonianos se encuentra una forma particular en la que aparecen los multiplicadores de Floquet. Se han tomado como principales referencias las recopilaciones de Yakubovich et al. [3], Meyer et al. [4] y Lichtenberg et al. [5].

Para obtener los multiplicadores es necesario recurrir a los métodos de la continuación numérica, herramienta imprescindible para el estudio de sistemas dinámicos no lineales. El objetivo fundamental de la continuación numérica es la obtención de un diagrama de bifurcaciones, que es una forma de representar a las familias de soluciones del sistema en función de un parámetro. En las situaciones en las que aparecen soluciones de diferente naturaleza cuando se modifica el valor de ese parámetro, se dice que ha ocurrido una *bifurcación* [1]. De manera formal, lo que ha cambiado es la estructura topológica del espacio de fases del sistema: aparecen (o desaparecen) nuevas soluciones (equilibrios, órbitas periódicas, etc).

Para identificar las ramas de soluciones y las bifurcaciones existe un software específico de continuación numérica, **AUTO**, ampliamente utilizado en la literatura de sistemas dinámicos no lineales y teoría de bifurcaciones, según se resume en el recopilatorio de Galán-Vioque et al. [6]. Generalmente, los parámetros se encuentran explícitos en las ecuaciones dinámicas y en la ley de evolución del sistema. AUTO se basa en este principio para detectar bifurcaciones y hallar el diagrama de continuación-bifurcación. Sin embargo, el parámetro fundamental que describe a un sistema hamiltoniano, la energía, no se encuentra implícito en las ecuaciones. A pesar de que se trata de un software completo y autosuficiente, no dispone de un módulo implícito para el estudio de sistemas dinámicos hamiltonianos debido a su especificidad.

Para adaptar las capacidades de AUTO al estudio de estos sistemas, Freire et al. [7] obtuvieron un método que emplea la detección de una bifurcación de tipo Hopf sobre un parámetro auxiliar, explícito en las ecuaciones, por lo que AUTO es capaz de detectar esa Hopf de forma sencilla. Por lo tanto, cuando este parámetro se anula aparece el sistema hamiltoniano. Otra gran ventaja que presenta AUTO es el cálculo de los multiplicadores de Floquet con un coste computacional muy bajo. El empleo de AUTO en el estudio de sistemas hamiltonianos tiene numerosas aplicaciones. Por ejemplo, ha resultado un éxito en el problema de los tres cuerpos [8]. Un estudio similar al realizado en este trabajo se encuentra en Galán-Vioque et al. [9] sobre el péndulo muelle. Incluso ocurre que algunos resultados obtenidos para el péndulo muelle, como la aparición de las resonancias 1:2 y 1:4 de forma más dominante que la 1:3 [10], puedan compararse directamente con los que se obtienen para el sistema molecular objeto de este estudio. También se ha empleado en la obtención de diagramas de bifurcación en sistemas moleculares de otros tipos [11] y en reacciones químicas [12].

El sistema molecular que se va a estudiar a través de la teoría de estabilidad y de la continuación numérica es la molécula de cianuro de potasio, KCN. La principal motivación procede del trabajo de Borondo et al. [13], en el que se describe la estructura del espacio de fases entorno a una configuración molecular concreta. Se trata de una descripción muy detallada a través de la sección de Poincaré, que en este sistema se trata de un plano de corte en el espacio de fases. Esto permite visualizar directamente la evolución, cómo aparecen y desaparecen resonancias a medida que se aumenta o disminuye la energía del sistema. Desde el punto de vista químico, el modelo para KCN se trata de un sistema molecular realista, debido a la precisión con la que se ha obtenido una de las características principales en el formalismo hamiltoniano, su potencial [14].

El sistema KCN pertenece a un grupo de sistemas denominados *floppy molecules*, caracterizados por un punto de silla en la función del potencial, por lo que los resultados generales obtenidos en moléculas de este tipo también pueden extenderse a éste. El principal interés de estos sistemas moleculares satisface la búsqueda de la correspondencia entre los resultados que se obtienen de forma separada de la Mecánica Clásica y de la Mecánica Cuántica, el formalismo de los sistemas físicos microscópicos, que ha motivado el estudio del caos cuántico [14, 15, 16, 17, 18, 19]. Por otra parte, existe gran interés en las implicaciones de la estructura del espacio de fases clásico sobre sus propiedades químicas y espectroscópicas (interacción con la radiación electromagnética), que son puramente cuánticas [20]. La introducción de la teoría de bifurcaciones en el estudio de sistemas químicos también se ha utilizado para la descripción de la evolución de las reacciones químicas, en las que el sistema que se considera es el conjunto de moléculas [20, 21]. Sin embargo, no se han encontrado indicios en la literatura de la aplicación de la continuación numérica para obtener el diagrama de bifurcaciones de un sistema molecular.

Con los antecedentes expuestos, el objetivo general de este trabajo es el estudio por continuación numérica de la estabilidad un sistema dinámico hamiltoniano con interés científico, la molécula KCN, caracterizando la estabilidad de órbitas periódicas a través de los multiplicadores de Floquet. Este objetivo general se divide en tres objetivos específicos:

- 1) Demostrar por qué los multiplicadores de Floquet son las cantidades que indican si una órbita periódica es estable o inestable, o si ocurre una bifurcación de soluciones periódicas, así como encontrar su forma particular en sistemas hamiltonianos.
- 2) Comprender el potencial de la continuación numérica para el estudio de sistemas dinámicos, con la ayuda del software AUTO.
- 3) Aplicar la teoría de estabilidad de Floquet y el método de continuación numérica a un sistema hamiltoniano no integrable de interés científico: el sistema molecular KCN.

El trabajo se estructura de la siguiente forma. En relación con el primer objetivo, en el capítulo 1 se realiza el estudio teórico general de la estabilidad de órbitas periódicas, comenzando por la sección de Poincaré y centrándonos en la teoría de Floquet, de la que resultan los multiplicadores que llevan su nombre. En el capítulo 2 se realiza una breve descripción de las características fundamentales de los sistemas hamiltonianos y en el capítulo 3 se particulariza la teoría general para este tipo de sistemas. Con respecto al segundo objetivo, en el capítulo 4 se resume cómo funciona el método de continuación numérica, con un apartado específico sobre la continuación de órbitas periódicas en sistemas hamiltonianos en AUTO. En el capítulo 5 se explica brevemente el manejo del software. Para cumplir el tercer objetivo, en el capítulo 6 se describe el sistema molecular KCN y se relaciona con el sistema péndulo-muelle. Los resultados de la aplicación del método de continuación numérica a través de AUTO se exponen en el capítulo 7, junto con una serie de secciones de Poincaré que se obtuvieron para visualizar la estructura del espacio de fases, y se cierra con la discusión de los resultados obtenidos y su comparación con los de Galán-Vioque et al. [9] y Borondo et al. [13]. El capítulo 8, por último, está dedicado a las principales conclusiones del trabajo y las propuestas de ampliación para futuras investigaciones.

Capítulo 1

Estabilidad de órbitas periódicas en sistemas dinámicos

El estudio de sistemas dinámicos puede hacerse a través de dos herramientas complementarias: la sección de Poincaré y los multiplicadores de Floquet. En este capítulo se presentan ambos conceptos y se aportan los resultados más importantes. En concreto, la teoría general de Floquet se enuncia para ser particularizada en capítulos posteriores para sistemas hamiltonianos. Las demostraciones de las proposiciones, lemas y teoremas expresadas en el capítulo se han tomado principalmente de Kuznetsov [1], Yakubovich [3], Meyer [4] y Lichtenberg [5].

Sea un sistema dinámico no lineal autónomo, real, de dimensión N :

$$\dot{x} = f(x) \tag{1.1}$$

con $x \in \mathbb{R}^N$, y con $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ diferenciable. Sea una órbita T -periódica $x(t)$, de periodo $T \in \mathbb{R}$, solución del sistema (1.1), por lo que satisface que:

$$x(t + T) = x(t) \tag{1.2}$$

A continuación se analiza la estabilidad de esta órbita periódica.

1.1. Sección de Poincaré

La sección de Poincaré es una herramienta fundamental en el estudio de sistemas dinámicos, sobre todo en aquellos en los que existen órbitas periódicas. Supongamos un sistema dinámico con N dimensiones, la sección de Poincaré es una hipersuperficie de $N - 1$ dimensiones en la que se pretende recoger toda la información posible relacionada con la dinámica del sistema. Esto es particularmente útil cuando la sección de Poincaré tiene 2 dimensiones, puesto que se trata de un plano, y cuando ocurren bifurcaciones las secciones de Poincaré para diferentes valores de los parámetros permiten apreciar visualmente como va cambiando la topología del espacio de fases.

Consideramos el sistema dinámico autónomo (1.1) y la solución T -periódica (1.2), denotada por $x^0(t)$ [1]. Tomamos un punto $x_0 \in x^0(t)$ y consideramos un hiperplano $\Pi \subseteq \mathbb{R}^{N-1}$ tal que $x_0 \in \Pi$, de forma que intersecta a $x^0(t)$ con un ángulo no nulo. Puede definirse entonces una función escalar $g : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^1$, con $g(x^0) = 0$, por lo que:

$$\Pi = \{x \in \mathbb{R}^N : g(x) = 0\} \tag{1.3}$$

Que el ángulo de intersección entre $x^0(t)$ y Π sea no nulo implica que $\nabla g(x)$ no es ortogonal a $x^0(t)$ en x_0 . Por esta razón, la elección más simple para Π es el hiperplano ortogonal a $x^0(t)$ en x_0 , definido por:

$$g(x) = \langle f(x_0), x(t) - x_0 \rangle \tag{1.4}$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota el producto escalar estándar en \mathbb{R}^N .

Como $x^0(t)$ es una solución periódica, si inicialmente el sistema se encuentra en $x_0 \in x^0(t)$, transcurrido un tiempo T el sistema se encuentra en el mismo punto x_0 . Por lo tanto, una órbita $x(t)$ que empiece en un punto suficientemente cerca de x_0 en Π , sea $x \in \Pi$, transcurrido cierto tiempo volverá a Π en algún punto $\tilde{x} \in \Pi$. Además esta órbita cercana también intersecta a Π transversalmente. Esto permite definir una aplicación de retorno \mathcal{P} , denominada **sección de Poincaré**, tal que:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}: \Pi &\rightarrow \Pi \\ x &\mapsto \tilde{x} = \mathcal{P}(x) \end{aligned}$$

donde \tilde{x} es la primera intersección de la órbita $x(t)$ con la hipersuperficie de referencia Π . Para el caso $N = 3$ se puede ver en la Figura 1.1. Por lo tanto, la aplicación de Poincaré induce un sistema dinámico discreto, en el que el paso, n , son los cortes con la superficie Π . Las relaciones de recurrencia son del tipo:

$$x_{n+1} = \mathcal{P}(x_n) \quad (1.5)$$

Notar lo siguiente [22]:

1. \mathcal{P} no es un campo vectorial.
2. Una órbita periódica es un punto fijo en la aplicación de Poincaré, tal que $x = \mathcal{P}(x)$. Por lo tanto, se aprecian como un punto en la sección de Poincaré.
3. Un toroide se vería como un círculo. Esto cobra una gran importancia en el estudio de sistemas hamiltonianos, por la aparición de órbitas cuasiperiódicas, que se estudian en la Sección 2.2.1.

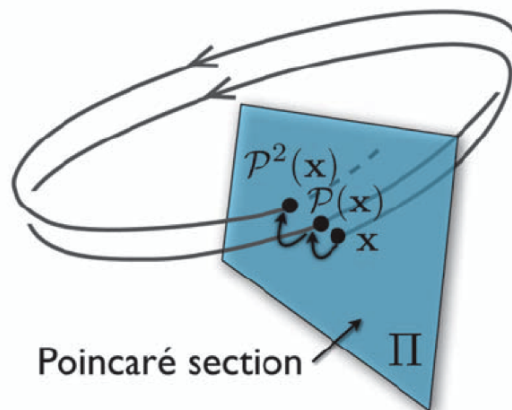


Figura 1.1: Aplicación de Poincaré sobre el plano Π en el caso de $N = 3$. Por lo tanto, la sección de Poincaré es un plano de 2 dimensiones. Tomada de [22].

Existen infinitas secciones de Poincaré en un sistema dinámico. Como se ha expuesto, se recomienda elegir las transversales al mayor número de órbitas posible, de forma que englobe a la mayor parte posible del espacio de fases y, por tanto, recoja mayor información sobre la dinámica.

Por otra parte, la sección de Poincaré permite estudiar la estabilidad de las órbitas periódicas. Éstas son puntos fijos de la aplicación de Poincaré, $x_0 = \mathcal{P}(x_0)$. Definiendo sobre Π un sistema de referencia de coordenadas locales $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_{N-1})$, con origen $\phi = 0$ en x_0 , tal que $0 = \mathcal{P}(0)$.

Por lo tanto, se trata de un punto de equilibrio en la sección de Poincaré, luego el jacobiano evaluado en el origen,

$$A = \left(\frac{d\mathcal{P}}{d\phi} \right)_{\phi=0} \quad (1.6)$$

aporta información sobre la estabilidad del punto fijo a través de sus autovalores, el conjunto: $\{\mu_1, \dots, \mu_{N-1}\}$, y por lo tanto de la órbita periódica. Además, su valor no depende de la elección de x_0 sobre la órbita periódica $x^0(t)$, únicamente depende de la órbita escogida. De lo contrario, sería imposible estudiar la estabilidad a partir de los autovalores de la sección de Poincaré.

Lema 1.1. [1] *Los autovalores del jacobiano A de la sección de Poincaré asociados a la órbita periódica $x^0(t)$ son independientes de las elecciones del punto $x_0 \in x^0(t)$, del hiperplano Π y de las coordenadas locales sobre Π escogidas.*

1.2. Linealización de sistemas periódicos no lineales

Consideramos el sistema dinámico autónomo no lineal (1.1) y la solución T -periódica (1.2). Tomamos una solución en la vecindad de ésta, $x'(t)$, tal que:

$$x'(t) = x(t) + \xi(t) \quad (1.7)$$

donde $\xi(t)$ es la desviación de $x(t)$ para dar lugar a $x'(t)$. Entonces, puede escribirse:

$$\dot{\xi}(t) = \dot{x}'(t) - \dot{x}(t) = f(x(t) + \xi(t)) - f(x(t))$$

Desarrollando el primer término en serie de Taylor centrada en $x(t)$ se obtiene:

$$f(x(t) + \xi(t)) = f(x(t)) + \nabla f(x(t))\xi(t) + O(\|\xi(t)\|^2)$$

Sustituyendo en (1.2):

$$\dot{\xi}(t) = A(t)\xi(t) + O(\|\xi(t)\|^2)$$

donde $A(t) = \nabla f(x(t))$. Como se considera $x'(t)$ una órbita en la vecindad de $x(t)$, la desviación es lo suficientemente pequeña para poder truncar los términos de orden mayor que el primero, luego se llega a:

$$\dot{\xi}(t) = A(t)\xi(t) \quad (1.8)$$

que se trata de un sistema dinámico lineal, y de coeficientes T -periódicos, $A(t+T) = A(t)$, debido a que $x(t)$ es T -periódica.

Definición 1.1. *El sistema dinámico periódico (1.8) se denomina **ecuación variacional** de la órbita T -periódica $x(t)$, solución de (1.1).*

Por lo tanto, el estudio de la estabilidad de la órbita periódica $x(t)$, solución del sistema no lineal (1.1), se reduce al estudio de sus ecuaciones variacionales, que son lineales.

1.3. Teoría de Floquet

La teoría de Floquet es la teoría general de la estabilidad de los sistemas de ecuaciones variacionales (1.8) de los sistemas periódicos no lineales de la forma (1.1). La siguiente proposición trata sobre la periodicidad de la solución del sistema variacional:

Proposición 1.1. *Sea $\xi(t)$ una solución del sistema (1.8). Entonces la solución es T -periódica, $\xi(t+T) = \xi(t)$, si y solo si $\xi(0) = \xi(T)$.*

Notar que la solución trivial $\xi(t) = 0$, $\forall t \in \mathbb{R}$ es una solución y es periódica. Por tanto, lo que nos interesa es trabajar con soluciones periódicas no triviales. La solución general del sistema puede escribirse, dada una condición inicial no nula $\xi(t=0) = \xi_0$, como:

$$\xi(t) = \Delta(t)\xi_0 \quad (1.9)$$

donde $\Delta(t)$ se denomina **matriz fundamental de soluciones**, con $\Delta(0) = I$, donde I es la matriz identidad $N \times N$. Sus columnas son soluciones linealmente independientes del sistema.

Proposición 1.2. [1, 3, 4] *La matriz fundamental de soluciones satisface las siguientes propiedades:*

- I) *Es una matriz no singular.*
- II) *Satisface la relación: $\Delta(t+T) = \Delta(t)\Delta(T)$*
- III) *Las columnas de $\Delta(t)$ se corresponden con las derivadas parciales de la solución $x(t)$ respecto de sus condiciones iniciales.*
- IV) *La evolución del determinante viene dada por la fórmula de Liouville-Jacobi:*

$$\det \Delta(t) = \det \Delta(0) \exp \int_0^t \text{traza } A(s) ds \quad (1.10)$$

donde $\det \Delta(0) = 1$ y $\text{traza } A(s) = \text{traza } \nabla f(x(s)) = \text{div } f(x(s))$.

En estas condiciones, se estudian las características de estabilidad del sistema. Dos elementos fundamentales son los siguientes.

Definición 1.2. *La matriz fundamental de soluciones en $t=T$, $\Delta(T)$, se denomina **matriz de monodromía** o **matriz de estabilidad** del sistema (1.8).*

Mediante la matriz de monodromía podemos escribir:

$$\xi(T) = \Delta(T)\xi_0$$

e iterando n veces [23]:

$$\xi(nT) = [\Delta(T)]^n \xi_0 \quad (1.11)$$

por lo que transcurridos n periodos, la evolución del sistema viene determinada únicamente por la matriz de monodromía, luego de ésta dependerá la estabilidad de la órbita periódica. Su interpretación geométrica viene dada por la Figura 1.2.

Definición 1.3. *Los autovalores $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$ de la matriz de monodromía $\Delta(T)$ se denominan **multiplicadores característicos** o **de Floquet** del sistema.*

Veamos por qué la estabilidad de las soluciones del sistema (1.8) dependen de los multiplicadores de Floquet. Éstos son las soluciones de la ecuación característica:

$$\det |\Delta(T) - \lambda I| = 0 \quad (1.12)$$

Sea a_1 el autovector de $\Delta(T)$ de multiplicador λ_1 , se satisface:

$$\Delta(T)a_1 = \lambda_1 a_1 \quad (1.13)$$

Si consideramos una solución $\xi(t)$ del sistema variacional (1.8), de condición inicial $\xi(0) = a_1$, puede expresarse como:

$$\xi(t) = \Delta(t)a_1 \quad (1.14)$$

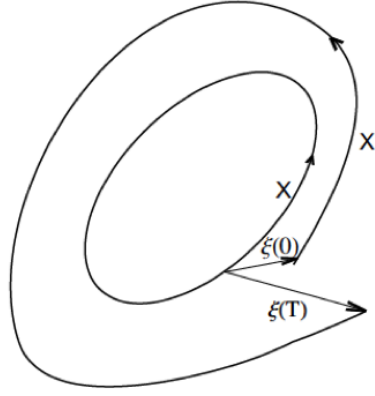


Figura 1.2: Órbita $x(t) = x(t+T)$, con $x' = x + \xi$ una solución del entorno, y ξ una desviación pequeña que satisface la relación (1.11). Tomada de [23].

por lo que transcurrido un periodo T :

$$\xi(t+T) = \Delta(t+T)a_1 = \Delta(t)\Delta(T)a_1 = \lambda_1\Delta(t)a_1$$

lo que implica, utilizando (1.14):

$$\xi(t+T) = \lambda_1\xi(t) \quad (1.15)$$

luego la evolución de la perturbación $\xi(t)$ transcurrido un periodo T es el mismo estado multiplicado por una constante λ_1 . Por esta razón, la estabilidad de la órbita periódica original depende de los multiplicadores. Existe una relación de este tipo para cada multiplicador λ_i .

De la relación anterior se deduce que los multiplicadores λ_i no pueden ser mayores que 1 en soluciones estables. En estas condiciones, el siguiente resultado permite formalizar el estudio de la estabilidad a partir los multiplicadores. Se trata del teorema de Floquet-Lyapunov.

Teorema 1.1 (Floquet-Lyapunov). [3] *La matriz fundamental de soluciones $\Delta(t)$ del sistema lineal (1.8), con $\Delta(0) = I$, toma la forma:*

$$\Delta(t) = F(t)e^{Kt} \quad (1.16)$$

donde $F(t)$ es una función matricial $N \times N$, T -periódica $F(t) = F(t+T)$, no singular en $\forall t \in \mathbb{R}$, con derivada continua y con $F(0) = I$, y donde K es una matriz $N \times N$ de coeficientes constantes.

Como $\Delta(t)$ es no singular en $\forall t \in \mathbb{R}$ entonces admite logaritmo, luego puede definirse K :

$$K = \frac{1}{T} \ln \Delta(T) \implies \Delta(T) = e^{KT} \quad (1.17)$$

Como $A(t)$ es una matriz de coeficientes reales, $\Delta(t)$ también es de coeficientes reales, pero K generalmente es compleja.

Un importante corolario es el Teorema de Reducibilidad de Lyapunov. También es otra forma en la que se suele encontrar el teorema de Floquet-Lyapunov.

Corolario 1.1. [4] *Dado el cambio de variables $\xi = F(t)w$, el sistema (1.8) se escribe como:*

$$\dot{w} = Kw \quad (1.18)$$

donde K es una matriz de coeficientes constantes $N \times N$ definida por (1.17).

De este resultado se deduce que las propiedades de estabilidad del sistema dependen completamente de la matriz K , esto es, de sus autovalores.

Definición 1.4. *Los autovalores de la matriz K definida en (1.17) se denominan **exponentes característicos** o **coeficientes de estabilidad** del sistema.*

Los autovalores de K pueden relacionarse con los multiplicadores de Floquet. En efecto, teniendo en cuenta $\Delta(T)a = \lambda a$, la ecuación característica $Kb = \alpha b$, y la relación (1.17), se deduce que:

$$\lambda = e^{\alpha T} \implies \alpha = \frac{1}{T} \ln \lambda \quad (1.19)$$

Como $\lambda \in \mathbb{C}$, la rama del logaritmo complejo se toma arbitraria y los exponentes característicos pueden determinarse a través de los multiplicadores salvo una constante $2m\pi i/T$, con $m \in \mathbb{Z}$.

La forma general de la solución del sistema variacional (1.8), teniendo en cuenta la forma de $\Delta(t)$ en (1.16) y un autovector a , dada la perturbación inicial $\xi_0 = a$, se puede expresar como:

$$\xi(t) = \Delta(t)a = F(t)e^{Kt}a = F(t)e^{at}a$$

definiendo $f(t) = F(t)a$, se deduce que:

$$\xi(t) = f(t)e^{at} \quad (1.20)$$

con $f(t)$ una función T -periódica, $f(t) = f(t+T)$. Por lo tanto, la órbita T -periódica $x(t)$, solución de (1.1), se dice que es **estable** o **elíptica** cuando todos sus multiplicadores característicos satisfacen:

$$\Re(\alpha) \leq 0 \implies |\lambda| \leq 1 \quad (1.21)$$

lo que significa que todos los multiplicadores de Floquet deben encontrarse en el círculo unidad del plano complejo, dentro o sobre éste. En caso contrario, si algún multiplicador satisface que $\lambda > 1$, se dice que la órbita es **inestable** o **hiperbólica**.

De forma general, pueden darse los siguientes casos para deducir la estabilidad de la órbita a través de sus multiplicadores [3]:

- Estabilidad asintótica: todos los multiplicadores dentro del círculo unidad, $|\lambda| < 1$
- Inestabilidad: al menos un multiplicador satisface $|\lambda| > 1$.

El sistema variacional (1.8) tiene siempre una solución T -periódica, correspondiente a $\dot{x}(t)$ y así $\lambda = 1$ es siempre multiplicador de Floquet según (1.15). Esto se obtiene diferenciando el sistema original (1.1) respecto al tiempo:

$$\ddot{x} = \frac{\partial}{\partial t} f(x(t)) = \frac{\partial f(x(t))}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = \nabla f(x(t))\dot{x} = A(t)\dot{x}$$

luego $\dot{x}(t)$ es la solución, con perturbación inicial $\dot{x}(0) = \xi(0)$ (ver Figura 1.3). El sistema variacional podrá presentar otras soluciones T -periódicas siempre asociadas al multiplicador de Floquet $\lambda = 1$, que ese caso tendría multiplicidad geométrica mayor o igual a 2.

Al principio del capítulo, se indicaba que los multiplicadores de Floquet y la sección de Poincaré son herramientas complementarias para el estudio de la dinámica. El siguiente resultado es la expresión formal que verifica esta afirmación.

Teorema 1.2. [24] *Los autovalores del jacobiano de \mathcal{P} asociado a la órbita T -periódica $x(t)$, $\{\mu_i\}_{i=1}^{N-1}$, del sistema (1.1), coinciden con los multiplicadores de Floquet asociados a $x(t)$, $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$, a través del sistema variacional (1.8), siendo eliminado de este conjunto el autovalor unidad que aparece como consecuencia de la periodicidad de $x(t)$. Por lo tanto, tomando $\lambda_1 = 1$:*

$$\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} = \{1, \mu_1, \dots, \mu_{N-1}\} \quad (1.22)$$

Por lo tanto, un conjunto de los multiplicadores coinciden con los autovalores del jacobiano de la aplicación de Poincaré, siendo entonces las mismas cantidades encontradas de formas diferentes. Este resultado refuerza el concepto de herramientas complementarias para el estudio de la estabilidad de sistemas dinámicos, de forma que se busca por un lado, caracterizar la estabilidad de las órbitas periódicas (1.2) a través de los multiplicadores de Floquet, y por otro lado, la visualización de la dinámica entorno a (1.2) a través de las secciones de Poincaré en los casos en los que éstas sean un plano.

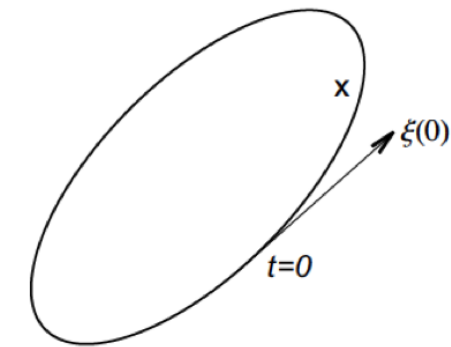


Figura 1.3: Órbita periódica $x(t)$, donde $\xi(t)$ es una desviación pequeña. $\xi(0)$ es autovector de la matriz de monodromía $\Delta(T)$ con autovalor $\lambda = 1$, por lo que se corresponde con $\dot{x}(0)$. Tomada de [23].

Capítulo 2

Sistemas dinámicos hamiltonianos

En este capítulo se exponen las características principales de los sistemas hamiltonianos en Mecánica Clásica. Un estudio más profundo puede encontrarse en dos manuales clásicos de referencia: Goldstein [25] y en Gantmacher [26]. En el primer apartado se exponen solamente las principales propiedades y se demuestran las de nuestro interés: la propiedad simpléctica y el teorema de Liouville. Se introduce el concepto de constante de movimiento. En el segundo apartado se hace una distinción entre los sistemas integrables y no integrables. En el tercero, se expone una primera aproximación hacia la construcción de la sección de Poincaré en un sistema con 2 grados de libertad, es decir, 4 dimensiones.

2.1. Mecánica Hamiltoniana

2.1.1. Formalismo

En Mecánica Clásica en general, para definir la posición de un sistema de n partículas en el espacio, es necesario emplear $3n$ coordenadas. En ocasiones este número puede reducirse, debido a que existen relaciones entre ellas (y por las simetrías en el sistema, como veremos en la molécula KCN). Estas relaciones se denominan **ligaduras**, y son independientes de las fuerzas que actúan sobre el sistema. Las ligaduras independientes del tiempo se denominan esclerónomas, de lo contrario se dice que son reónomas. Pueden reducir el número de coordenadas del sistema.

Definición 2.1. *Sea un sistema de n partículas y sea ℓ el número de ligaduras. Se denominan **grados de libertad del sistema**, N , al número de coordenadas independientes necesario para describir la posición del sistema en el espacio. Viene definido por:*

$$N = 3n - \ell$$

Cualesquiera N cantidades independientes que definan completamente la posición del sistema, $\{q_1, q_2, \dots, q_N\}$, se denominan **coordenadas generalizadas**.

El formalismo hamiltoniano se debe a W.R. Hamilton, publicado en 1833. La ventaja principal frente a otras formulaciones de la Mecánica Clásica, como la de Lagrange, es que se reduce la dinámica de ecuaciones diferenciales de segundo orden, a ecuaciones diferenciales de primer orden. El precio a pagar es que se dobla el número de ecuaciones del sistema, $2N$, pero se obtiene una formulación de la Mecánica que es más simétrica y elegante, así como ecuaciones más sencillas de resolver.

Las variables del sistema equivalente de primer orden son las coordenadas generalizadas $q = \{q_i\}_{i=1}^N$, y los **momentos canónicos conjugados de q_i** , $p = \{p_i\}_{i=1}^N$. Además, se introduce la función $H(q, p, t)$ denominada **Hamiltoniano**. Como vamos a considerar que las ligaduras y las fuerzas que actúan sobre el sistema no dependen del tiempo, el tiempo t no aparecerá de forma

explícita en el hamiltoniano. Las ecuaciones dinámicas del sistema se denominan **ecuaciones canónicas de Hamilton**:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (2.1)$$

donde $i = 1, \dots, N$. Las cantidades (q, p) son las **variables canónicas**, y el espacio de $2N$ dimensiones en el que transcurre la dinámica se denomina **espacio de fases**. Como se trata de un sistema dinámico determinista, cada punto del espacio de fases $(q(t), p(t))$ pertenece a una única órbita, cuya evolución viene unívocamente determinada por las ecuaciones de Hamilton.

La energía es la magnitud principal que define a los sistemas conservativos, es la cantidad que se mantiene constante en todo el movimiento. Fijado un valor, todas las órbitas del espacio de fases tienen la misma energía. Para que esto ocurra deben darse las siguientes condiciones:

- I) El sistema es autónomo, por lo que el hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo.
- II) La energía cinética T es una función exclusivamente cuadrática de los momentos conjugados, $T = \sum_{i=1}^N c_i p_i^2$.
- III) La energía potencial V no depende de los momentos conjugados, $V = V(q_i)$.

y entonces el hamiltoniano, H , se corresponde con la energía mecánica del sistema, E :

$$E = T + V = H(q, p) \quad (2.2)$$

Esta es la base de los sistemas hamiltonianos conservativos.

2.1.2. Propiedad simpléctica

La notación simpléctica es una notación compacta que hace posible escribir las ecuaciones de Hamilton (2.1) en forma matricial. Sea x un vector de $2N$ elementos, $x = (x_1, \dots, x_{2N})$, dado por:

$$\begin{aligned} \{x_i\}_{i=1}^N &= \{q_i\}_{i=1}^N, \\ \{x_{N+1}\}_{i=1}^N &= \{p_i\}_{i=1}^N \end{aligned}$$

Sea el vector $\partial H / \partial x = \nabla H$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial H}{\partial x} \right)_i &= \frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \left(\frac{\partial H}{\partial x} \right)_{N+i} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \end{aligned}$$

Sea J la denominada **matriz simpléctica**, real, de dimensiones $2N \times 2N$ como:

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -I_N \\ I_N & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

donde I_N denota a la matriz identidad $N \times N$. Se trata de una matriz antisimétrica, por lo que satisface que:

$$J^T = J^{-1} = -J \quad (2.4)$$

$$J^2 = -I_{2N} \quad (2.5)$$

Esta matriz permite escribir las ecuaciones canónicas de Hamilton en forma simpléctica.

Definición 2.2. Se denomina **ecuación canónica** a las ecuaciones canónicas de Hamilton expresadas en forma simpléctica:

$$\dot{x} = -J\nabla H \quad (2.6)$$

A continuación se presenta el enunciado formal de la propiedad simpléctica que se utiliza en el formalismo hamiltoniano:

Definición 2.3. Se dice que una matriz M es **simpléctica** si satisface la propiedad simpléctica:

$$M^T J M = J \quad (2.7)$$

donde J es una matriz real, no singular y antisimétrica.

2.1.3. Matriz hamiltoniana y teorema de Liouville

Las siguientes propiedades permiten deducir un resultado importante en sistemas hamiltonianos: el teorema de Liouville. Éste indica que el volumen que ocupan las trayectorias en el espacio de fases es constante durante toda su evolución. La siguiente propiedad de los sistemas hamiltonianos es una de las formas que permite demostrarlo:

Definición 2.4. Se dice que una matriz A es **hamiltoniana** si satisface la siguiente propiedad:

$$A^T J + J A = 0 \quad (2.8)$$

donde J es una matriz real, no singular y antisimétrica.

La demostración del teorema utiliza además la fórmula de Liouville-Jacobi (1.10), por lo que necesitamos buscar propiedades de la matriz jacobiana de $-J\nabla H$, que es $-J\nabla^2 H$, donde el operador ∇^2 denota al hessiano.

Proposición 2.1. [4] La matriz jacobiana de $-J\nabla H$, $-J\nabla^2 H$, es hamiltoniana.

Proposición 2.2. [4] La traza de una matriz hamiltoniana es nula.

El teorema de Liouville reza como sigue.

Teorema 2.1 (Liouville). El volumen en el espacio de fases ocupado por el conjunto de soluciones de la ecuación canónica es constante para $\forall t \in \mathbb{R}$

Demostración. Utilizando las proposiciones ya enunciadas, se deduce que: $P = \nabla(-J\nabla H) = -J\nabla^2 H \implies \text{traza } P = 0$. Además, $\det \Delta(0) = 1$. Luego, por la fórmula de Liouville-Jacobi:

$$\det \Delta(t) = \exp \left(\int_0^t \text{traza } P ds \right) = \exp 0 = 1$$

Como la matriz fundamental de soluciones tiene como columnas las derivadas parciales de la solución respecto de las condiciones iniciales, resulta que el determinante del jacobiano es igual a 1, por lo que se deduce que el volumen ocupado por las trayectorias es el mismo para $\forall t \in \mathbb{R}$. \square

2.1.4. Constantes de movimiento

Las constantes de movimiento son funciones cuyo valor permanece invariante a lo largo de una trayectoria dinámica en el espacio de fases. Para detectarlas es necesario definir primero los **corchetes de Poisson**. Sean dos funciones F, G , de las variables canónicas (q, p) , el corchete de Poisson viene dado por:

$$[F, G] = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right) \quad (2.9)$$

Dotado de las siguientes propiedades:

- 1) Antisimetría: $[F, G] = -[G, F]$
- 2) Bilinealidad: $[aF + bG, H] = a[F, H] + b[G, H]$, con $a, b \in \mathbb{C}$
- 3) Identidad de Jacobi: $[F, [G, H]] + [H, [F, G]] + [G, [H, F]] = 0$

Supongamos que $F = F(q, p, t)$, entonces puede demostrarse que su derivada temporal viene dada por:

$$\frac{dF}{dt} = [F, H] + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (2.10)$$

donde H es el hamiltoniano del sistema. Si F no depende explícitamente del tiempo, y su corchete de Poisson $[F, H] = 0$, se tiene que F es una **constante de movimiento** durante toda la evolución del sistema, o **integral primera**. Su presencia está relacionada con la integrabilidad del sistemas hamiltonianos, como se verá en el siguiente apartado. Además, si $F = H$ y éste no depende implícitamente del tiempo, se llega a la conservación de la energía, debido a que el corchete de Poisson del hamiltoniano consigo mismo se anula, $[H, H] = 0$. En notación de corchetes de Poisson, las ecuaciones de Hamilton pueden escribirse de forma simétrica y elegante, como se comentó al presentar este formalismo:

$$\dot{q}_i = [q_i, H], \quad \dot{p}_i = [p_i, H] \quad (2.11)$$

donde $i = 1, \dots, N$.

2.2. Sistemas integrables y no integrables

Para definir la integrabilidad de sistemas dinámicos hamiltonianos, vamos a considerar sistemas autónomos, de forma que el hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo.

2.2.1. Sistemas integrables: toro invariante y órbitas periódicas

Definición 2.5. *Sea un sistema hamiltoniano, cuyo hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo, con N grados de libertad. Se dice que este sistema es **integrable** si es posible encontrar N funciones $F_i(q, p)$, $i = 1, \dots, N$, independientes entre sí, que permanecen constantes a lo largo de cada trayectoria dinámica del sistema. Entonces, para $\alpha \in \mathbb{R}^N$, $\alpha = \{\alpha\}_{i=1}^N$, se tiene el siguiente sistema de ecuaciones:*

$$F_i(q, p) = \alpha_i \quad (2.12)$$

En consecuencia, de la ecuación (2.12), se pueden escribir los momentos conjugados canónicos p como función de q y α . Esto permite reducir la dimensión del problema y el hamiltoniano puede escribirse solamente como función de las coordenadas generalizadas. Las ecuaciones de Hamilton serían separables y la solución se reduce al cálculo de N integrales [5]. No existe un método para encontrar las integrales primeras, a menos que procedan de simetrías fácilmente reconocibles del sistema. Para que el sistema tenga solución, debe cumplirse que las N cantidades sean independientes entre sí, de forma que:

$$[F_i, F_j] = 0 \quad (2.13)$$

$\forall i, j = 1, \dots, N$, y se dice que las F_i están en involución.

La existencia de las constantes de movimiento $\{F_i\}_{i=1}^N$ implica, genéricamente, que las órbitas en el espacio de fases se encuentran sobre **toros invariantes**.

Todas estas consideraciones quedan englobadas dentro del denominado teorema de Arnol'd-Liouville, cuyo enunciado y demostración puede encontrarse en [27]. La estructura toroidal invariante de la dinámica del sistema motiva a formular el problema a través de otro conjunto de variables canónicas, ampliamente utilizadas en Física, denominadas **variables de acción-ángulo**, (I, θ) , cuyo sistema de referencia es más apropiado para describir los movimientos en el toro. En estas coordenadas, el hamiltoniano de sistemas integrables solo depende de las variables de acción: $H = H(I)$. Las ecuaciones de Hamilton en coordenadas acción-ángulo son:

$$\begin{aligned}\dot{I} &= -\frac{\partial H(I)}{\partial \theta} = 0 \implies I(t) = I(t_0) \\ \dot{\theta} &= \frac{\partial H(I)}{\partial I} = \omega(I) \implies \theta(t) = \omega(I)t + \theta(t_0),\end{aligned}$$

por lo que en sistemas integrables las variables de acción son constantes y las variables de ángulo son linealmente dependientes con el tiempo. El vector $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_N)$ corresponde con las frecuencias del movimiento a lo largo del toro y son solamente función de las acciones.

En el caso de 2 grados de libertad hay 2 frecuencias sobre cada toro, ω_1 y ω_2 . Pueden distinguirse dos casos según el cociente entre ambas. Si el cociente entre ambas es un número racional, entonces $\omega_i/\omega_j = p/q$, con $p, q \in \mathbb{N}$, y ocurre que todas las trayectorias sobre el toro son cerradas. El movimiento de frecuencia ω_1 da p vueltas en el mismo tiempo que el movimiento de frecuencia ω_2 da q vueltas. Se dice entonces que el sistema presenta una **resonancia sub-armónica**, y ambas trayectorias son **órbitas periódicas**. La otra posibilidad es que el cociente sea irracional, el movimiento de ambas frecuencias cubren de forma densa la superficie del toro, sin volver a cruzarse en ningún punto. Entonces todas las trayectorias sobre el toro nunca se cierran sobre sí mismas y se dice entonces que son **órbitas cuasiperiódicas**.

En un sistema de N dimensiones, para presentar órbitas periódicas deben tenerse $N - 1$ relaciones del tipo:

$$\omega \cdot m = 0 \tag{2.14}$$

donde m es un vector de números enteros. Si no existen estas relaciones, el movimiento será cuasiperiódico.

2.2.2. Sistemas no integrables: estructura KAM

La consecuencia fundamental de la no integrabilidad de las ecuaciones de Hamilton es la aparición del **caos determinista**, denominado así debido a la aparente aleatoriedad de la trayectoria que se describe en el espacio fásico. Sin embargo, no se trata de un movimiento estocástico, debido a que se trata de un sistema dinámico con una ley de evolución bien definida.

En estas condiciones no existe un conjunto de N constantes de movimiento, al menos, solo se presenta una: la energía. Entonces, en los sistemas conservativos no integrables el movimiento transcurre dentro de una superficie de dimensión $N - 1$ denominada **hipersuperficie de energía**. Para estudiar la dinámica en estas condiciones, la primer aproximación son los sistemas cuasi-integrables, en los que se hace una división del hamiltoniano en parte integrable, H_0 , y no integrable, H_1 , de forma que:

$$H(I, \psi) = H_0(I) + \epsilon H_1(I, \psi) \tag{2.15}$$

donde $\epsilon \in \mathbb{R}$ es pequeño. Por lo tanto, se trata de una perturbación del hamiltoniano integrable de orden ϵ . Notar que el par (I, ψ) son variables canónicas, pero no son variables acción-ángulo, ya que el movimiento no tiene por qué transcurrir en un toro y porque ψ aparece en el hamiltoniano. El comportamiento que se observa para pequeñas perturbaciones es que gran parte de la

estructura del sistema integrable se mantiene, conservando la mayoría de toros invariantes, aunque deformados. Asimismo, se pueden encontrar trayectorias fuera de la superficie de los toros, en el interior de la hipersuperficie de energía, y que se mueven de forma caótica [5].

En este escenario, interesa conocer qué toros se destruirán y cuáles se mantendrán para un valor dado de la perturbación. El resultado que resuelve esta cuestión es el teorema KAM (Kolmogorov - Arnold - Moser). El estudio del teorema KAM merece un trabajo aparte, por lo que solo se indica su resultado principal [5, 28]: los toros que sobreviven son aquellos para los que el cociente ω_i/ω_j es lo suficientemente irracional, esto es, que satisfagan la desigualdad:

$$|m \cdot \omega| > k(\epsilon) |m|^{-N-1} \quad (2.16)$$

donde m es un vector de números enteros, N el número de grados de libertad y $k(\epsilon)$ es una constante que depende de ϵ , de forma que es más grande cuanto mayor es la perturbación. En comparación con la ecuación (2.14), se deduce que las órbitas periódicas y las resonancias sub-armónicas no van a sobrevivir a medida que crezca la perturbación, siendo destruidos, de forma que sus órbitas pasarán a moverse bajo todo el espacio ocupado por la hipersuperficie de energía, de manera caótica.

2.3. Sección de Poincaré en sistemas con 2 grados de libertad

La aparición y destrucción de órbitas periódicas, resonancias sub-armónicas y toros invariantes en sistemas no integrables se aprecia de forma notable en la sección de Poincaré. Concretamente, cuando el sistema hamiltoniano tiene 2 grados de libertad, es decir, 4 dimensiones, la sección de Poincaré es un plano. El movimiento está restringido a una hipersuperficie de energía $E = H(q, p)$, de dimensión 3, lo que permite despejar una de las variables canónicas fijado un valor de la energía. Por lo tanto, la sección de Poincaré en este problema es un plano de 2 dimensiones.

Los sistemas integrables tienen trayectorias periódicas o cuasiperiódicas, en función de la relación de frecuencias sobre cada toro. En los sistemas no integrables resulta que sobreviven solamente los toros cuya relación de frecuencias es lo suficientemente irracional. En el plano de la sección de Poincaré, los toros se ven como círculos. Por lo tanto, las trayectorias periódicas serán puntos, debido a que no cubren el toro de forma densa. Las trayectorias cuasiperiódicas se verán como círculos, porque cubren al toro de forma densa. Cuando una trayectoria es caótica, ésta cortará a la sección de Poincaré por diferentes puntos que, en principio, no siguen ningún patrón y, según la teoría KAM, cubrirán toda la región entre los toros invariantes y la hipersuperficie de energía. Esto puede verse en la Figura 2.1. Las regiones de caos en las que se pierde todo vestigio del sistema integrable se denomina mar ergódico, y se trata de una región densa en la sección de Poincaré [22].

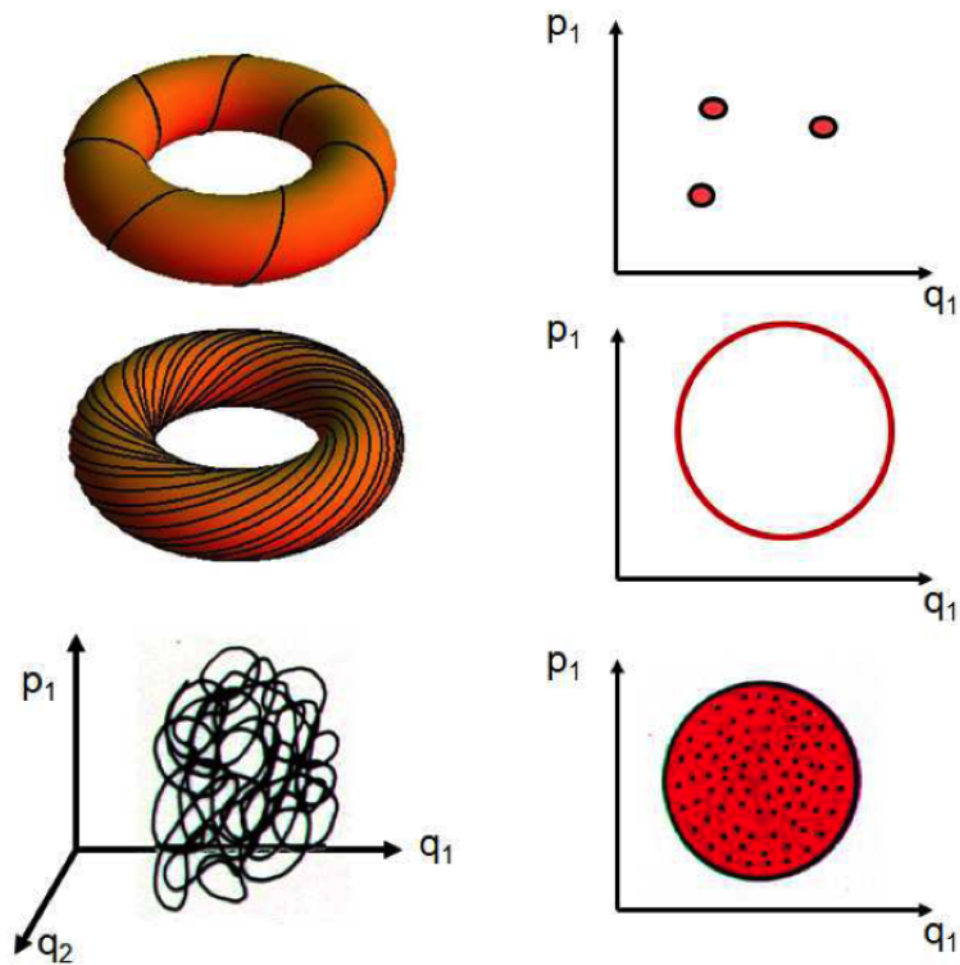


Figura 2.1: Intersecciones de los diferentes tipos de trayectorias con la sección de Poincaré en un sistema conservativo de 4 dimensiones. Arriba, un toro invariante que presenta trayectorias periódicas resonantes. En el medio, un toro con una trayectoria cuasiperiódica. Abajo, una trayectoria caótica. Tomada de [19].

Capítulo 3

Estabilidad de órbitas periódicas en sistemas hamiltonianos

Una vez estudiado el formalismo hamiltoniano y la presencia de órbitas tanto periódicas, como cuasiperiódicas y caóticas, estamos en condiciones de estudiar la estabilidad de las órbitas periódicas a través de la teoría de Floquet aplicada a este tipo de sistemas, encontrando como resultado fundamental el teorema de Lyapunov-Poincaré. Se obtiene que los multiplicadores de Floquet tienen una forma muy particular en los sistemas hamiltonianos. En este capítulo se introduce el estudio de las bifurcaciones de órbitas periódicas y de los cambios de estabilidad, particularizados para sistemas con 2 grados de libertad.

Sea un sistema dinámico hamiltoniano conservativo, generalmente no integrable, de N grados de libertad (dimensión $2N$):

$$\dot{x} = -J\nabla H(x) \quad (3.1)$$

con $x \in \mathbb{R}^{2N}$, y $H(x) : \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciable.

3.1. Ecuaciones variacionales de Poincaré

De igual forma que se hizo en la teoría general, para estudiar la estabilidad de soluciones periódicas en un sistema hamiltoniano no lineal es necesario linealizar la ecuación canónica. La deducción de este apartado puede aplicarse también a hamiltonianos que dependen explícitamente del tiempo. Sea $x(t)$ una órbita T -periódica solución de (3.1), con condiciones iniciales $x(0) = x_0$. Sea $x'(t)$ una órbita vecina, solución de (3.1) y $x'(0) = x'_0$ cercano a x_0 . La desviación $\xi(t)$ entre ambas puede escribirse como:

$$\xi(t) = x'(t) - x(t) \quad (3.2)$$

Entonces, derivando respecto al tiempo:

$$\dot{\xi} + \dot{x} = -J\nabla H(\xi + x)$$

Como ξ es una pequeña desviación de la trayectoria, puede expandirse el hamiltoniano H en serie de Taylor y truncar en la aproximación de primer orden:

$$H(\xi + x) = H(x) + \nabla H(x)\xi + O(\xi^2) \quad (3.3)$$

Por lo tanto, para pequeñas desviaciones $\xi(t)$ de $x(t)$, se satisface que:

$$\dot{\xi} + \dot{x} = -J\nabla[H(x) + \nabla H(x)\xi] = -J\nabla H(x) - J\nabla^2 H(x)\xi$$

Los primeros términos corresponden con la ecuación canónica para $x(t)$, por lo que la desviación satisface las denominadas **ecuaciones variacionales de Poincaré**:

$$\dot{\xi} = -J\nabla^2 H\xi \quad (3.4)$$

análogas a las ecuaciones variacionales (1.8), y se trata de un sistema hamiltoniano lineal. Como el hamiltoniano H es real y no singular, se trata de un sistema dinámico lineal tal y como se ha descrito en el Capítulo 1.

3.2. Teorema de Lyapunov-Poincaré

El siguiente teorema caracteriza a la matriz fundamental de toda solución de (3.4):

Teorema 3.1. [3, 4] *La matriz real y no singular $\Delta(t)$ es la matriz fundamental de (3.4) si y solo si satisface la propiedad simpléctica:*

$$\Delta^T(t)J\Delta(t) = J \quad (3.5)$$

Como consecuencia de este teorema, como la matriz fundamental de soluciones es simpléctica para $\forall t \in \mathbb{R}$, también lo es la matriz de monodromía, en $t = T$:

$$\Delta^T(T)J\Delta(T) = J \quad (3.6)$$

La propiedad simpléctica permite particularizar el teorema de Floquet-Lyapunov para sistemas hamiltonianos. En estas condiciones, puede enunciarse el teorema de Lyapunov-Poincaré:

Teorema 3.2 (Lyapunov-Poincaré). [3] *Sea una órbita T -periódica $x(t)$ solución del sistema hamiltoniano $\dot{x} = -J\nabla H$, de ecuación variacional $\dot{\xi} = -J\nabla^2 H(x)\xi$ y matriz de monodromía $\Delta(T)$. Los multiplicadores de Floquet aparecen como una 4-uplas:*

$$\lambda, \lambda^*, 1/\lambda, 1/\lambda^* \quad (3.7)$$

por lo que son simétricos, en sentido de inversión, respecto del círculo unidad y del eje real en el plano complejo.

Cabe destacar que el mismo resultado del teorema de Lyapunov-Poincaré se consigue a partir de sistemas dinámicos reversibles [29, 30]. Éstos satisfacen la propiedad de invariancia frente a inversión temporal, $t \rightarrow -t$. Los sistemas hamiltonianos son sistemas reversibles, por lo que los resultados son coherentes y podrían haber sido obtenidos por esta vía.

Hay dos casos particulares en la 4-upla de multiplicadores:

- Si algún autovalor λ satisface: $\text{Im}(\lambda) = 0$, entonces $1/\lambda$ también es autovalor porque $\lambda = \lambda^*$, y se trata de un par real simétrico en sentido de inversión sobre $(1,0)$ ó $(-1,0)$.
- Si algún autovalor λ satisface: $|\lambda| = 1$, entonces λ^* es también autovalor porque $\lambda = 1/\lambda$, y se trata de un par complejo conjugado sobre el círculo unidad.

Todos los casos en los que se dan los autovalores se muestran en la Figura 3.1.

A raíz de la aparición de los multiplicadores como 4-upla, tenemos por un lado que:

Corolario 3.1. [5] *Un sistema conservativo tiene un multiplicador de Floquet doble con valor 1.*

Y por otro lado se arroja el siguiente corolario:

Corolario 3.2. [4, 5] *En sistemas conservativos no existen órbitas asintóticamente estables.*

A continuación, vamos a dilucidar las consecuencias del movimiento de los multiplicadores de Floquet sobre el círculo unidad, a medida que varía la energía del sistema. En estas condiciones ocurren bifurcaciones de las soluciones periódicas, con cambios en el periodo. Concretamente, es posible que los multiplicadores se encuentren, en lugares conocidos como puntos críticos, en los que pueden ocurrir cambios de estabilidad de las soluciones y las correspondientes bifurcaciones.

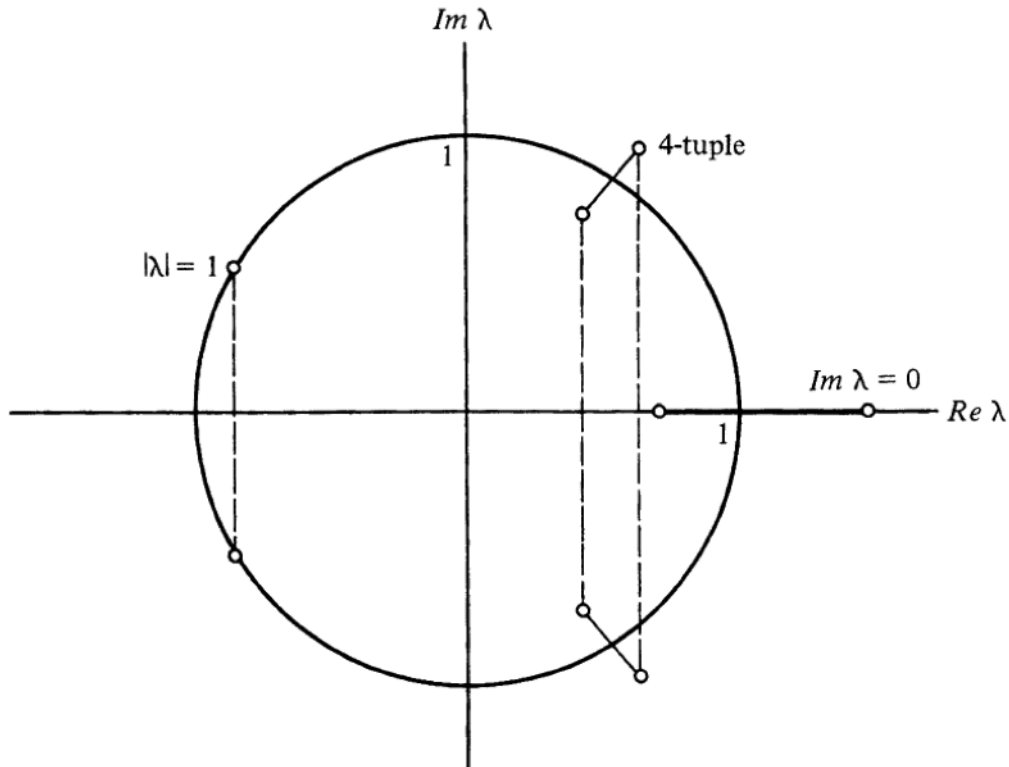


Figura 3.1: Se aprecian sobre el círculo unidad en el plano complejo las formas en las que aparecen las 4-uplas de multiplicadores de Floquet. Notar los casos especiales en los que se tratan de pares complejos conjugados y de par real simétricos en sentido de inversión. Se comprueba en todo caso que los autovalores son simétricos respecto del círculo unidad en el sentido de inversión. Tomada de [5].

3.3. Bifurcaciones de órbitas periódicas con 2 grados de libertad

A medida que cambia la energía del sistema, los multiplicadores de Floquet correspondiente a una órbita concreta cambian, de forma que dan vueltas por el círculo unidad en el plano complejo. Recordar que en un sistema hamiltoniano, cuando un multiplicador está sobre el círculo unidad tiene un complejo conjugado, también sobre el círculo unidad. Al moverse aparecen nuevas familias de órbitas periódicas, a partir de bifurcaciones tangente y bifurcaciones sub-armónicas. A continuación se hace una breve descripción de estas bifurcaciones; sus formas normales pueden encontrarse en [4].

En la **bifurcación tangente o de doble 1** un par de multiplicadores se encuentran en el punto $(1, 0)$ del plano complejo, de forma que ambos autovalores del par tienen valor $+1$ real. Como ambos se han encontrado, se trata de un punto crítico. Por lo tanto, el exponente:

$$|\lambda| = 1 \implies \begin{cases} \alpha = 0 \\ \alpha = i2\pi/T \end{cases} \quad (3.8)$$

por lo que la nueva familia de órbitas periódicas que reemplaza a la anterior mantiene el periodo T de la órbita original.

Las **bifurcaciones subarmónicas o de periodo múltiple** ocurren a medida que los multiplicadores se mueven a lo largo del círculo unidad, y se pueden apreciar atendiendo al argumento. Estas dan lugar a resonancias sub-armónicas de las órbitas periódicas, que fueron descritas en la

Sección 2.2.1. Notar que el exponente de estabilidad puede escribirse como:

$$\alpha = i \frac{2\pi p}{T q} \quad (3.9)$$

con $p, q \in \mathbb{N}$. Tras describirse la órbita q veces, el exponente toma la forma:

$$\alpha = i \frac{2\pi}{T} p$$

lo que significa que aparece una nueva familia de órbitas periódicas de periodo qT , a partir de la órbita original T -periódica. Un caso particular ocurre cuando $p = 1$ y $q = 2$, donde:

$$\alpha = i\pi \quad (3.10)$$

que se conoce como **bifurcación de duplicación de periodo**. Notar que en este caso el argumento es igual a π , luego ocurre en el punto $(-1, 0)$ del plano complejo. Por lo tanto, se trata de un punto crítico en el que se encuentran dos multiplicadores, que toman valor -1 .

Los cambios de estabilidad de la órbita periódica pueden ocurrir en los puntos críticos, tanto en las bifurcaciones de doble 1 como en las duplicaciones de periodo. Cuando se da una bifurcación de doble 1 o de duplicación de periodo sin que ocurra un cambio en la estabilidad, se dice generalmente que se trata de una **bifurcación *passing***. En caso contrario, se trata de una **bifurcación *splitting***.

Para concluir este apartado, a partir los multiplicadores pueden definirse los **índices de estabilidad**, que permiten reconocer si la órbita es estable o inestable y son ampliamente utilizados en Mecánica Celeste [31]. En los puntos críticos de una órbita originalmente estable los multiplicadores toman valores reales $\lambda = \pm 1$ y aparecen como pares recíprocos. Los índices se definen como su suma:

$$\rho = \lambda + \lambda^{-1} \quad (3.11)$$

Por lo que hay tantos índices como grados de libertad tenga el sistema. En consecuencia, una solución T -periódica de un sistema hamiltoniano autónomo es estable si y solo si todos sus índices de estabilidad ρ son reales y $|\rho| \leq 2$ [32]. Siempre existe un índice trivial de valor 2 correspondiente a la pareja de multiplicadores de valor 1 doble. Por lo tanto, en sistemas con 2 grados de libertad solo es necesario atender a un único índice de estabilidad no trivial, que tomaría los siguientes valores:

- $|\rho| < 2$: los autovalores λ_3, λ_4^* son complejos conjugados $\lambda_3 = \lambda_4^*$, con módulo 1, luego la órbita es estable.
- $|\rho| > 2$: los autovalores λ_3, λ_4 son reales y positivos, luego la órbita es inestable y $\lambda_3 = 1/\lambda_4$.
- $\rho = +2$: punto crítico en el que $\lambda_3 = \lambda_4 = +1$ se encuentran. Se trata de una bifurcación de doble 1 que puede ser *passing* o *splitting*.
- $\rho = -2$: punto crítico en el que $\lambda_3 = \lambda_4 = -1$ se encuentran. Se trata de una bifurcación de duplicación de periodo que puede ser *passing* o *splitting*.

Cabe destacar que existen criterios para predecir cuando la bifurcación de doble 1 o de duplicación de periodo será *passing* o *splitting*. Estos criterios están dados por el teorema de Krein y el teorema de Moser, y pueden encontrarse en Howard & MacKay [32].

Capítulo 4

Continuación numérica de soluciones

Los integradores numéricos aportan información sobre el comportamiento transitorio de un sistema dinámico. Sin embargo, cuando el objetivo es el estudio de las soluciones estacionarias y periódicas, su estabilidad y su transición a comportamientos más complejos, la continuación numérica y las técnicas de bifurcaciones son muy potentes y eficaces.

En este capítulo se describen los fundamentos teóricos que sustentan la aplicación de este tipo de técnicas, en las que se basan los softwares como AUTO. Se consideran solamente los resultados más importantes, un estudio más extenso puede encontrarse en [6], en el que se presentan además las demostraciones de todos los teoremas expuestos en esta sección (salvo el Teorema 4.6).

4.1. Teoría de la continuación numérica

Sea \mathcal{B} un espacio de Banach completo y normado (en nuestro caso se tratará de \mathbb{R}^n). Para $x_0 \in \mathcal{B}$ se denota por $S_\rho(x_0)$ la bola cerrada de radio ρ centrada en x_0 , es decir:

$$S_\rho(x_0) = \{x \in \mathcal{B} : \|x - x_0\| \leq \rho\}$$

La existencia y unicidad de soluciones en este espacio se fundamenta sobre dos teoremas principales: el Teorema de la Contracción y el Teorema de la Función Implícita.

Teorema 4.1 (Teorema de la Contracción). [6] *Sea una función continua $F : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ en un espacio de Banach \mathcal{B} y supongamos que para algún $x_0 \in \mathcal{B}$, $\rho > 0$, y algún K_0 con $0 \leq K_0 \leq 1$, se tiene que:*

$$\begin{aligned} \|F(u) - F(v)\| &\leq K_0 \|u - v\|, \forall u, v \in S_\rho(x_0) \\ \|F(x_0) - x_0\| &\leq (1 - K_0)\rho \end{aligned}$$

Entonces la ecuación

$$x = F(x), x \in \mathcal{B}$$

tiene una única solución $x_* \in \mathcal{B}$, que se trata del límite de la sucesión:

$$x_{k+1} = F(x_k), k = 0, 1, 2, \dots$$

El segundo teorema asegura la existencia de una solución que depende de los parámetros.

Teorema 4.2 (Teorema de la Función Implícita (IFT)). [6] *Sea la función $G : \mathcal{B} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathcal{B}$ que satisface:*

a) $G(u_0, \lambda_0) = 0$, $u_0 \in \mathcal{B}$, $\lambda_0 \in \mathbb{R}^n$.

b) $G_u(u_0, \lambda_0)$ es no singular con inversa acotada: $\|G_u(u_0, \lambda_0)^{-1}\| \leq M$, para algún $M > 0$.

c) G y G_u son Lipschitz-continuas, es decir, $\forall u, v \in S_\rho(u_0)$, y $\forall \lambda, \mu \in S_\rho(\lambda_0)$, se satisfacen las siguientes desigualdades para algún $K_L > 0$:

$$\begin{aligned} \|G(u, \lambda) - G(v, \mu)\| &\leq K_L (\|u - v\| + \|\lambda - \mu\|) \\ \|G_u(u, \lambda) - G_u(v, \mu)\| &\leq K_L (\|u - v\| + \|\lambda - \mu\|) \end{aligned}$$

Entonces $\exists \delta: 0 < \delta \leq \rho$, y $\exists! u(\lambda)$ función continua en $S_\delta(\lambda_0)$, con $u(\lambda_0) = u_0$, que satisface:

$$G(u(\lambda), \lambda) = 0, \forall \lambda \in S_\delta(\lambda_0)$$

De esta forma, el IFT permite demostrar que una solución persiste, de manera local, bajo una variación de parámetros. Con estos dos resultados se demuestra la existencia de una única familia de soluciones local $u(\lambda)$, empleando suposiciones leves. Si se impone la condición de que $F(u, \lambda)$ es continuamente diferenciable en λ , se puede demostrar que $u(\lambda)$ es también continuamente diferenciable. Queda enunciado en el siguiente teorema.

Teorema 4.3. [6] *En las condiciones en las que se satisface el IFT, se supone que la derivada $G_\lambda(u, \lambda)$ es continua en $S_\rho(u_0) \times S_\rho(\lambda_0)$. Entonces la rama de soluciones $u(\lambda)$ tiene una derivada continua $u_\lambda(\lambda)$ en $S_\delta(u_0) \times S_\delta(\lambda_0)$.*

4.2. Métodos de continuación de soluciones

El IFT juega un papel fundamental en el diseño de algoritmos de continuación de soluciones de ecuaciones no lineales, debido a que los problemas son fuertemente dependientes de los parámetros. Se consideran problemas que dependen de un único parámetro, de la forma:

$$G(u, \lambda) = 0 \tag{4.1}$$

donde $u, G(\cdot, \cdot) \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \in \mathbb{R}$. Sea $x \equiv (u, \lambda)$, la ecuación se puede reescribir como:

$$\begin{aligned} G(x) &= 0 \\ G: \mathbb{R}^{n+1} &\rightarrow \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

En primer lugar, se establece la definición de solución regular:

Definición 4.1. *Una solución x_0 de $G(x) = 0$ se dice que es **regular** si la matriz $G_x^0 \equiv G_x(x_0)$, de dimensiones $n \times (n + 1)$, tiene rango máximo, es decir, $\text{Rango}(G_x^0) = n$.*

Para identificar las soluciones regulares de $G(u, \lambda) = 0$ se dan dos casos de rango máximo:

$$\text{Rango}(G_x^0) = \text{Rango}(G_u^0 | G_x^0) = n \iff \begin{cases} \text{i) } G_u^0 \text{ es no singular} \\ \text{ii) } \dim \mathcal{N}(G_u^0) = 1, G_\lambda^0 \notin \mathcal{R}(G_u^0) \end{cases}$$

donde $\mathcal{N}(G_u^0)$ es el espacio nulo de G_u^0 y $\mathcal{R}(G_u^0)$ es el rango de G_u^0 . En el primer caso, el IFT aporta la prueba de existencia de la solución $u = u(\lambda)$ en el entorno de x_0 . En el segundo caso es posible intercambiar columnas en el jacobiano G_x^0 para ver cómo la solución se puede parametrizar por uno de los componentes de u . Notar que este segundo consiste en un pliegue, que se ejemplifica en la Figura 4.1. La parametrización de u implica el siguiente resultado:

Teorema 4.4. [6] *Sea $x_0 = (u_0, \lambda_0)$ una solución regular de $G(x)=0$. Entonces, en el entorno de x_0 , existe un único continuo de una dimensión de soluciones $x(s)$, denominada **familia de soluciones** o **rama de soluciones**, con $x(0) = x_0$.*

Por lo tanto, los métodos de continuación numérica se utilizan para encontrar las familias de soluciones. En lo que sigue se tratan los métodos de continuación para ambos casos de solución regular.

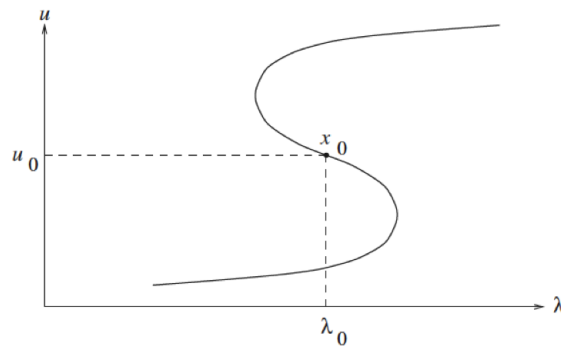


Figura 4.1: Una rama de soluciones de $G(u, \lambda) = 0$, en la que se aprecian dos pliegues. Tomada de [6].

4.2.1. Continuación de parámetros

En el primer caso, se supone que G_u^0 es no singular. Suponemos que la solución únicamente se define por el parámetro λ , por lo que no hay pliegues en el diagrama de bifurcación. Sea (u_0, λ_0) una solución de (4.1), $G(u_0, \lambda_0) = 0$, y sea el vector director $\dot{u}_0 = du/d\lambda$. El objetivo es calcular la solución u_1 que se da con $\lambda_1 = \lambda_0 + \Delta\lambda$, como se ilustra en la Figura 4.2. Esto se puede resolver aplicando el método de Newton:

$$\begin{cases} G_u(u_1^{(\nu)}, \lambda_1) \Delta u_1^0 = -G_\lambda(u_1^{(\nu)}, \lambda_1) \\ u_1^{(\nu+1)} = u_1^{(\nu)} + \Delta u_1^0 \end{cases} \quad (4.2)$$

donde $\nu = 0, 1, 2, \dots$ es el número de la iteración para alcanzar la solución u_1 , y la aproximación inicial es:

$$u_1^0 = u_0 + \Delta\lambda \dot{u}_0 \quad (4.3)$$

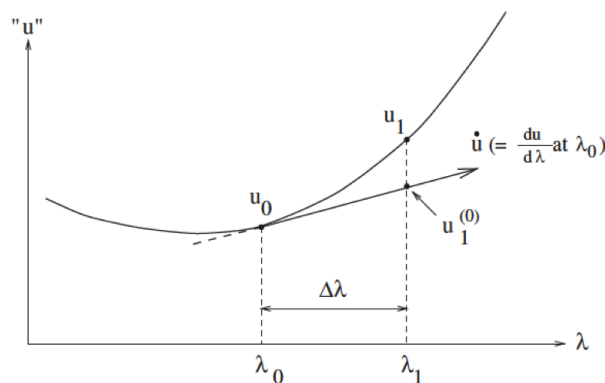


Figura 4.2: Interpretación gráfica de la continuación de parámetros. Tomada de [6].

La convergencia de la iteración se garantiza por la teoría de convergencia del método de Newton, debido a que $G_u(u_1, \lambda_1)$ es no singular. Para la siguiente iteración se calcula el nuevo vector director \dot{u}_1 de la siguiente forma:

$$G_u(u_1, \lambda_1) \dot{u}_1 = -G_\lambda(u_1, \lambda_1) \quad (4.4)$$

que procede de diferenciar $G(u(\lambda), \lambda) = 0$ respecto a λ en $\lambda = \lambda_1$.

4.2.2. Continuación por pseudo-longitud de arco de Keller

Cuando existen pliegues en el diagrama de bifurcaciones, la aproximación del punto de bifurcación mediante el método de Newton no converge, debido a que G_u se hace singular en ese

punto de pliegue. Por esta razón, se aplica el método de la pseudo-longitud de arco de Keller y es el que emplea el software AUTO.

Sea una solución (u_0, λ_0) de (4.1) y sean los vectores directores $(\dot{u}_0, \dot{\lambda}_0)$ respecto a la proyección Δs de $(\dot{u}_0, \dot{\lambda}_0)$ sobre $(u_1 - u_0, \lambda_1 - \lambda_0)$, en $\Delta s = 0$. Las ecuaciones para hallar (u_1, λ_1) son las siguientes:

$$\begin{cases} G(u_1, \lambda_1) = 0 \\ (u_1 - u_0)^* \dot{u}_0 + (\lambda_1 - \lambda_0) \dot{\lambda}_0 - \Delta s = 0 \end{cases} \quad (4.5)$$

Su interpretación geométrica se encuentra en la Figura 4.3.

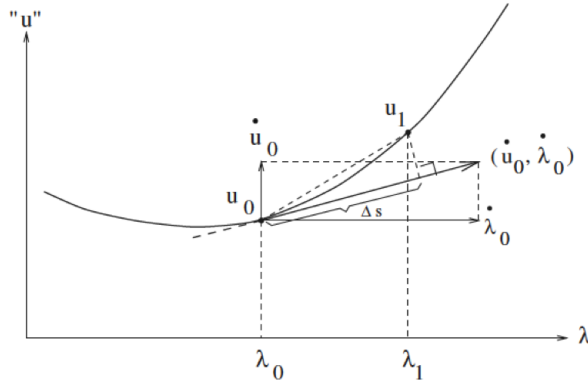


Figura 4.3: Interpretación geométrica de la continuación de por pseudo-longitud de arco de Keller, independiente de los parámetros. Tomada de [6].

El sistema (4.5) se puede resolver utilizando el método de Newton en la iteración ν :

$$\begin{pmatrix} G_u^{1(\nu)} & G_\lambda^{1(\nu)} \\ \dot{u}_{0*} & \dot{\lambda}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta u_1^{(\nu)} \\ \Delta \lambda_1^{(\nu)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} G(u_1^{(\nu)}, \lambda_1^{(\nu)}) \\ (u_1^{(\nu)} - u_0)^* \dot{u}_0 + (\lambda_1^{(\nu)} - \lambda_0) \dot{\lambda}_0 - \Delta s \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

donde el vector director se define de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} G_u & G_\lambda \\ \dot{u}_{0*} & \dot{\lambda}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{u}_1 \\ \dot{\lambda}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Notar que:

- En la práctica $(\dot{u}_1, \dot{\lambda}_1)$ puede calcularse con una sustitución extra posterior.
- La orientación de la rama se mantiene si Δs es suficientemente pequeño.
- El vector director debe ser normalizado: $\|\dot{u}_1\|^2 + \dot{\lambda}_1^2 = 1$.

El método de continuación de la pseudo-longitud de arco puede aplicarse en todo punto regular de la solución debido al siguiente resultado:

Teorema 4.5. [6] *El jacobiano del sistema de la pseudo-longitud de arco es no singular en un punto solución regular.*

4.3. Resolución de problemas de valor en la frontera

De forma general, AUTO resuelve los problemas de valor en la frontera (BVP, por su nombre en inglés) de la forma:

$$\dot{u}(t) - f(u(t), \mu, \lambda) = 0 \text{ para } t \in [0, 1] \quad (4.8)$$

donde $u(\cdot), f(\cdot) \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \in \mathbb{R}$ y $\mu \in \mathbb{R}^{n\mu}$. Está sujeto a las siguientes condiciones de frontera:

$$b(u(0), u(1), \mu, \lambda) = 0 \quad (4.9)$$

con $b(\cdot) \in \mathbb{R}^{n_b}$ y, si fuera necesario, también sujeto a las condiciones integrales del tipo:

$$\int_0^1 q(u(s), \mu, \lambda) ds = 0 \quad (4.10)$$

con $q(\cdot) \in \mathbb{R}^{n_q}$. El objetivo es resolver el BVP para $u(\cdot)$ y μ . Para formular correctamente el problema es necesario establecer la condición:

$$n_\mu = n_b + n_q \geq 0 \quad (4.11)$$

En este caso el parámetro de continuación es λ y se calcula la solución (u, μ) . Para resolver el BVP, AUTO concretamente emplea el método de colocación ortogonal. A continuación se aporta la idea general de este método.

En primer lugar, se genera una malla temporal, que puede o no autoajustarse en cada iteración, $\{t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_N = 1\}$, con paso $h = t_j - t_{j-1}$, $j = 1, \dots, N$. Se define un espacio vectorial de polinomios \mathcal{P}_h^m como:

$$\mathcal{P}_h^m = \{p_h \in C[0, 1] : p_h|_{[t_{j-1}, t_j]} \in \mathcal{P}^m\}$$

donde \mathcal{P}^m es el espacio vectorial de polinomios de grado $m \leq 3$. El método de colocación consiste en encontrar $p_h \in \mathcal{P}_h^m$ y $\mu \in \mathbb{R}^{n_\mu}$, tal que satisfacen el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\dot{p}_h(z_{j,i}) = f(p_h(z_{j,i}, \mu, \lambda)), \quad j = 1, \dots, N; \quad i = 1, \dots, m \quad (4.12)$$

y tal que p_h satisface las condiciones integrales y de frontera enunciadas anteriormente. Los puntos de colocación $z_{j,i}$ en cada subintervalo de tiempo $[t_{j-1}, t_j]$ son las raíces del polinomio ortogonal de grado m . Su interpretación gráfica está en la Figura 4.4.

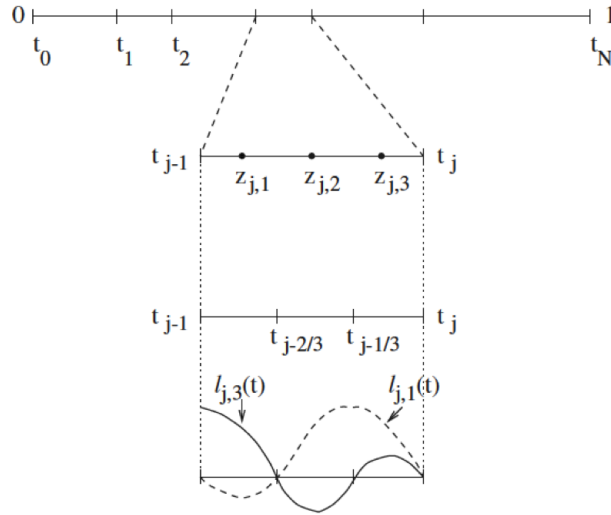


Figura 4.4: El mallado $\{0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = 1\}$. Los puntos de colocación se muestran para el caso $m = 3$, en el j -ésimo intervalo del mallado. Se muestran también dos de los cuatro polinomios de Lagrange de la base. Tomada de [6].

Para implementar computacionalmente el método de colocaciones se parte de la base de polinomios de Lagrange, $\{\ell_{j,i}(t)\}$, en cada subintervalo temporal $[t_{j-1}, t_j]$, definidos por:

$$\ell_{j,i}(t) = \prod_{k=0, k \neq i}^m \frac{t - t_{j-k/m}}{t_{j-i/m} - t_{j-k/m}} \quad (4.13)$$

donde:

$$t_{j-k/m} = t_j - \frac{i}{m} h_j$$

Los polinomios locales pueden escribirse como:

$$p_j(t) = \sum_{i=0}^m \ell_{j,i}(t) u_{j-i/m} \quad (4.14)$$

y las ecuaciones de colocación:

$$\dot{p}_j(z_{j,i}) = f(p_j(z_{j,i}), \mu, \lambda) \quad (4.15)$$

con las condiciones de frontera:

$$b_i(u_0, u_N, \mu, \lambda) = 0 \quad (4.16)$$

y las condiciones integrales:

$$\sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^m w_{j,i} q_k(u_{j-i/m}, \mu, \lambda) = 0 \quad (4.17)$$

donde $w_{j,i}$ son los coeficientes de Lagrange de cuadratura. Entonces, dada una solución previamente calculada de la rama, (u_0, μ_0, λ_0) y el vector director $(\dot{u}_0, m\dot{u}_0, \dot{\lambda}_0)$, la ecuación discretizada del método de la pseudo-longitud de arco es:

$$\sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^m w_{j,i} [u_{j-i/m} - (u_0)_{j-i/m}]^* (\dot{u}_0)_{j-i/m} + (\mu - \mu_0)^* \dot{\mu}_0 + (\lambda - \lambda_0) \dot{\lambda}_0 - \Delta s = 0 \quad (4.18)$$

La forma del sistema se ilustra en la Figura 4.5a, en la que el número de ecuaciones de colocación (mnN), ecuaciones de continuidad $(N-1)n$ y ligaduras $n_b + n_q = n + n_\mu$, suman el número total de grados de libertad, $(m+1)nN + n_q$, para un λ dado. AUTO resuelve estos sistemas de manera eficiente debido a que emplea el método de condensación de parámetros por eliminación de Gauss, de forma que se obtienen subsistemas desacoplados que resuelve en paralelo (Figura 4.5b).

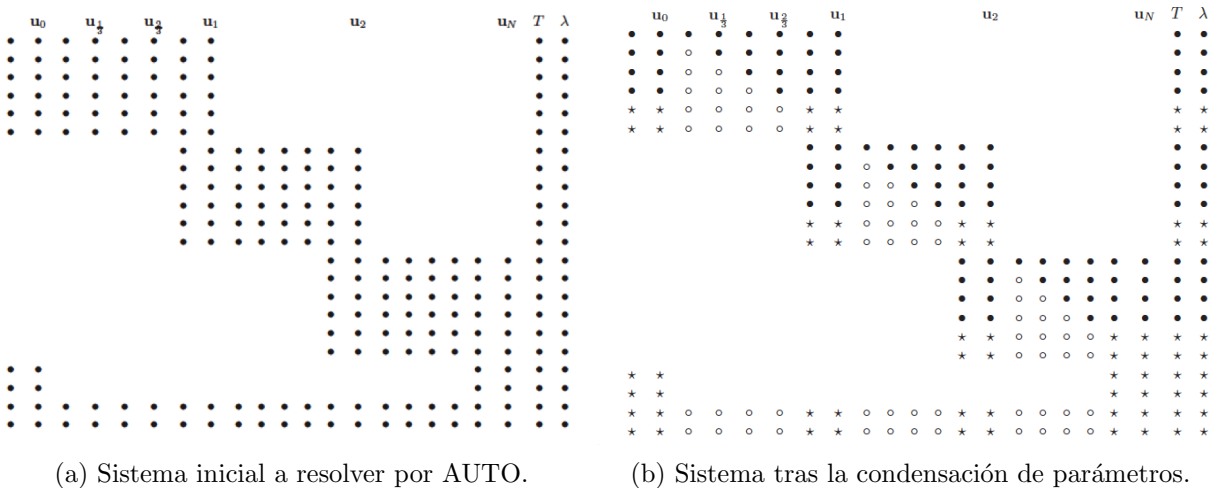


Figura 4.5: Estructura del jacobiano para el caso $n = 2$ con $N = 3$, $m = 3$, condiciones de frontera $n_b = 2$ y condiciones integrales $n_q = 1$. La última fila corresponde a la ecuación del pseudo-arco, que no se incluye en n_q . Notar a la derecha que se marcan con círculo los parámetros eliminados y con una estrella los subsistemas desacoplados, que se resuelven en paralelo. Tomada de [6].

4.4. Continuación de órbitas periódicas

Las soluciones periódicas se calculan a partir de un BVP. Sea el problema de primer orden:

$$\dot{u}(t) = f(u(t), \lambda) \quad (4.19)$$

con $u(\cdot), f(\cdot) \in \mathbb{R}^n$, y $\lambda \in \mathbb{R}$. Para normalizar el periodo de la solución, se realiza la transformación temporal $t \rightarrow t/T$, con $T \in \mathbb{R}$, por lo que la ecuación queda como:

$$\dot{u}(t) = Tf(u(t), \lambda) \quad (4.20)$$

y las soluciones periódicas que se buscan satisfacen que:

$$u(0) = u(1) \quad (4.21)$$

El periodo T no se conoce. Supongamos que partimos de una solución conocida, tal que $(u_{k-1}(\cdot), T_{k-1}, \lambda_{k-1})$, y queremos hallar la siguiente, $(u_k(\cdot), T_k, \lambda_k)$. Una solución posible es una traslación temporal de la primera, tal que $u_k(t) = u_{k-1}(t + \sigma)$, con $\sigma \in \mathbb{R}$. Entonces, se requiere una condición de fase para llegar a la siguiente solución. Una opción es imponer un desplazamiento mínimo mediante la condición de ortogonalidad de Poincaré (Figura 4.6):

$$(u_k(0) - u_{k-1}(0))^* u'_{k-1}(0) = 0 \quad (4.22)$$

a partir de la cuál se puede deducir la siguiente condición de fase integral que se encuentra implementada en AUTO:

$$\int_0^1 u'_k(t)^* u'_{k-1}(t) dt = 0 \quad (4.23)$$

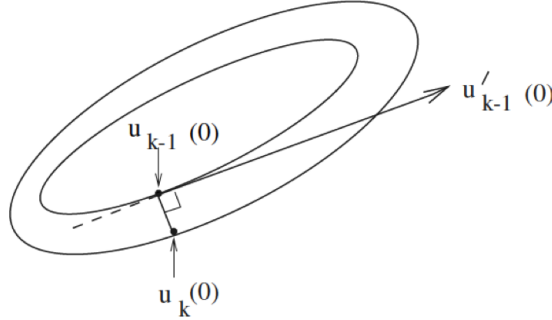


Figura 4.6: Interpretación gráfica de la condición de fase de Poincaré. Tomada de [6].

La continuación de una familia de soluciones periódicas se hace también con el método de la pseudo-longitud de arco de Keller, debido a su eficacia para sobrepasar pliegues y ramas verticales, que aparecerán en el caso de sistemas conservativos. La ecuación es:

$$\int_0^1 (u_k(t) - u_{k-1}(t))^* \dot{u}_{k-1}(t) dt + (T_k - T_{k-1})^* \dot{T}_{k-1} + (\lambda_k - \lambda_{k-1}) \dot{\lambda}_{k-1} = \Delta s \quad (4.24)$$

Estas son las ecuaciones que AUTO resuelve cuando se le indica calcular soluciones periódicas. Además, durante la continuación es capaz de obtener los multiplicadores de Floquet de la órbita realizando una descomposición especial de la matriz de monodromía, que surge de la descomposición del jacobiano del sistema de colocación según el algoritmo de Fairgrieve [33].

4.5. Continuación de órbitas periódicas en sistemas hamiltonianos

Los sistemas hamiltonianos no son sistemas dinámicos genéricos, por lo que AUTO no está dotado de módulos que permitan trabajar con ellos directamente. Como ya se ha visto, estos sistemas tienen propiedades peculiares, sobre todo con respecto a las órbitas periódicas, debido a la conservación de la energía. El parámetro natural de continuación, por tanto, debería ser dicha cantidad conservada. Sin embargo, la energía no se presenta de forma explícita en las ecuaciones, por lo que no es posible continuarla directamente como parámetro [6].

Para solucionar este problema y proceder a la continuación de órbitas periódicas en sistemas hamiltonianos, se debe atacar el problema desde otra vía, a través de las técnicas que utiliza AUTO, desarrollada por Freire et al. [7]. Las órbitas periódicas dentro de una familia son uniparamétricas. Para encontrarlas, el sistema hamiltoniano se embebe dentro de un sistema disipativo caracterizado por un segundo parámetro. Para ello, a las ecuaciones del sistema se añade un término perturbativo de gradiente, por lo que el sistema hamiltoniano original se recupera cuando esta perturbación se anula. Cuando la perturbación es distinta de cero, la órbita periódica original puede ser asintóticamente estable o inestable, según el signo de la perturbación. Como la familia de órbitas periódicas comienza en un punto de equilibrio, cuando la perturbación se anula ocurre una bifurcación de Hopf, y el IFT nos da el resultado de continuación que buscamos.

A continuación se dan unas breves pinceladas de la formalización de este método. Sea un sistema dinámico autónomo $2N$ -dimensional hamiltoniano:

$$\dot{x} = f(x) \quad (4.25)$$

donde $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$, y que presenta una integral primera no trivial, $E : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$, que significa que cada órbita del sistema descansa sobre de un conjunto que encierra un volumen E , por lo que $\nabla E(x) \cdot f(x) \equiv 0$. Sea $x_0(t)$ una solución T_0 -periódica del sistema, sea $p_0 := x_0(0)$ un punto inicial de la órbita y sea M la matriz de monodromía, cuyos autovalores son los multiplicadores característicos de la solución periódica $x_0(t)$, o multiplicadores de Floquet. Para continuar la solución periódica $x_0(t)$ se reemplaza la ecuación anterior del sistema por:

$$\dot{x} = T[f(x) + \alpha \nabla E(x)] \quad (4.26)$$

que depende de dos parámetros reales, T y α , que son el periodo de la solución y el parámetro perturbativo, respectivamente. Se buscan soluciones 1-periódicas $x(t)$, con $(u(0), T, \alpha)$, en el entorno de $(p_0, T_0, 0)$. Se puede demostrar que éstas soluciones periódicas vecinas solo pueden darse si $\alpha = 0$:

$$\begin{aligned} E(x(1)) - E(x(0)) &= 0 \\ E(x(1)) - E(x(0)) &= \int_0^1 \nabla E(x(t)) \cdot \dot{x}(t) dt = \alpha T \int_0^1 \|\nabla E(x(t))\|^2 dt \end{aligned}$$

La integral es diferente de cero, porque se considera que $\nabla E(x(0))$ se encuentra cercano a $\nabla E(p_0) \neq 0$, y T es el periodo de la solución periódica vecina, luego no puede ser cero. La única posibilidad, es que $\alpha = 0$.

Se denota por $\tilde{x} = (t; p, T, \alpha)$ el flujo de (4.26). Para encontrar esta nueva solución periódica se impone la condición de periodicidad, que empiece y acabe en un punto p transcurrido un tiempo T : $\tilde{x} = (1; p, T, \alpha) = p$. Para eliminar también desplazamientos de fase se deben aplicar también condiciones de fase, por lo que se define la función:

$$\begin{aligned} G : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{R}^N \times \mathbb{R} \\ G(p, T, \alpha) &:= (\tilde{x}(1; p, T, \alpha) - p, \langle f(p_0), p - p_0 \rangle) \end{aligned}$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ define un producto escalar en \mathbb{R}^N y dadas las condiciones anteriores se satisface que $G(p_0, T_0, 0) = 0$. El problema se reduce a encontrar ceros de G para (p, T, α) en el entorno de $(p_0, T_0, 0)$. Se arroja entonces el siguiente teorema:

Teorema 4.6. [7] *Sea $x_0(t)$ una solución T_0 -periódica del sistema conservativo (4.25), sea $p_0 = x_0(0)$ un punto inicial, y matriz de monodromía M . Entonces las soluciones de la ecuación $G(p, T, \alpha) = 0$ consisten en una única curva en el entorno de $(p_0, T_0, 0)$ con $\alpha \equiv 0$. Concretamente, esta solución se puede escribir de la forma $\{(p^*(T), T, 0) | T \sim T_0\}$ para algún $p^* : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N$ tal que $p^*(T_0) = p_0$.*

Este teorema es un caso simplificado para un resultado general de la continuación de sistemas conservativos, que puede encontrarse detallado en Freire et al. [7]. La implementación numérica de este teorema se realiza intercambiando la condición periódica $\tilde{x}(1; p, T, \alpha) = p$ por una condición de frontera para la curva completa y una condición integral para la condición de fase de Poincaré. Escribiendo $\tilde{x}_0(t) := \tilde{x}(t; p_0, T_0, 0)$, el problema consiste en encontrar $(x(t), T, \alpha)$ en el entorno de $(\tilde{x}_0(t), T_0, 0)$ que satisface:

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = T[f(x) + \alpha \nabla E(x(t))] \\ x(1) = x(0) \\ \int_0^1 \langle \dot{\tilde{x}}_0(t), x(t) - \tilde{x}_0(t) \rangle = 0 \end{cases} \quad (4.27)$$

Para concluir este apartado, es necesario realizar un apunte sobre la continuación en una bifurcación de tipo Hopf, en la que se detecta el punto de equilibrio en el que comienza la familia de soluciones periódicas. En este tipo de bifurcaciones los autovalores de (4.26) cruzan el eje imaginario, por lo que toman la forma [2]:

$$\mu_1 = \bar{\mu}_3 = i\beta_1, \quad \beta_1 = 2\pi T_1^{-1} \quad (4.28)$$

$$\mu_2 = \bar{\mu}_4 = i\beta_2, \quad \beta_2 = 2\pi T_2^{-1} \quad (4.29)$$

entonces aparecen dos familias de soluciones de diferente periodo, T_1 y T_2 , que suelen denominarse familia de *periodo largo* y familia de *periodo corto*, respectivamente con $T_1 > T_2$, por su amplio uso en Mecánica Celeste y en el problema de los 3 cuerpos. La explicación formal se debe al Teorema de Centro de Lyapunov [34], bajo condiciones no resonantes entre ambos periodos. AUTO tampoco tiene incluida la programación para obtener las dos familias que emanan del equilibrio; por defecto realiza continuación en la familia de periodo largo. Para obtener la de periodo corto es necesario implementarla de forma específica.

Capítulo 5

Software de continuación AUTO

En este capítulo se expone una síntesis de las principales características del software de continuación AUTO para sistemas dinámicos no lineales. Un compendio detallado se encuentra en su manual [35].

5.1. Objetivos del software

AUTO es una herramienta de computación muy potente que permite realizar detecciones de bifurcaciones de puntos de equilibrios la forma:

$$\begin{aligned} f(u, p) &= 0, \\ f(\cdot, \cdot) &\in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

aunque la implementación de las ecuaciones del sistema dinámico se lleva a cabo como:

$$\begin{aligned} \dot{u}(t) &= f(u(t), p), \\ f(\cdot, \cdot), u(\cdot) &\in \mathbb{R}^n, p \in \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

donde p es un vector de parámetros de continuación, y está sujeto a las condiciones de contorno e integrales definidas en el capítulo anterior.

Las capacidades de AUTO para analizar sistemas de ecuaciones algebraicos son las siguientes:

- Calcular familias de soluciones.
- Localizar puntos de ramificación y calcular las familias que bifurcan automáticamente.
- Localizar bifurcaciones de Hopf y analizar sus propiedades. Esto es particularmente útil para analizar sistemas hamiltonianos.
- Localizar bifurcaciones de tipo pliegue.
- Encontrar extremos en funciones objetivo y continuarlo en más parámetros.

En cuanto a las capacidades de análisis de ecuaciones diferenciales ordinarias la lista es más larga, pero fundamentalmente es capaz de:

- Calcular familias de soluciones periódicas, estables e inestables, y calcular los multiplicadores de Floquet para caracterizarlas.
- Calcular pliegues, bifurcaciones de duplicación de periodo y bifurcaciones toro, en dos parámetros, detectando resonancias 1:1, 1:2, 1:3 y 1:4.
- Continuar curvas de órbitas homoclinas y detectar bifurcaciones de codim-2.
- Localizar extremos en familias de soluciones periódicas y continuarlos en más parámetros.

5.2. Archivos de entrada y ejecución

El código fuente del software está escrito en Fortran90, sin embargo, el usuario no necesita interactuar con éste de forma directa. El usuario solo debe especificar las condiciones del problema de interés y debe indicar al software qué detectar. Además, debe aportar un punto de partida para la continuación. Todas las instrucciones se especifican mediante los archivos de entrada, que son tres, denotados por xxx.f90, c.xxx, y xxx.auto, donde xxx hace referencia al nombre del modelo. Sus características se exponen en los siguientes apartados.

5.2.1. Archivo xxx.f90

Es el archivo en el que se determina el problema a analizar. Debe escribirse en lenguaje Fortran y contiene las siguientes rutinas:

- *FUNC*. Se definen las ecuaciones $\dot{u} = f(u, p)$ del problema.
- *STPNT*. Se define una solución inicial (u, p) sobre la que comenzar la continuación. No debe ser un punto de bifurcación. Se llama solo si la constante $IRS = 0$, que suele ser la primera ejecución de la continuación, de lo contrario siempre se comienza desde el punto especificado.
- *BCND*. Se definen las condiciones de frontera.
- *ICND*. Se definen las condiciones integrales.
- *FOPT*. Se define la función objetivo.
- *PVLS*. Se definen las *medidas de solución*. Son cálculos que se almacenan mientras se ejecuta la continuación: multiplicadores de Floquet, energía, norma, valor en la frontera, etc.

5.2.2. Archivo c.xxx

Es un archivo de constantes y parámetros en los que se indican cuáles de sus capacidades debe utilizar el software para analizar el problema especificado. El archivo genérico de constantes puede verse en la Figura 5.1. A continuación se describe la función de cada constante agrupadas por categorías: constantes del problema, de discretización, tolerancias, paso de continuación, límites de continuación, parámetros libres, constantes de cálculo y control de salida.

```
# Default AUTO Constants file
e = '', s='', dat='', sv=''
unames = {}, parnames = {}
U = {}, PAR = {}
NDIM= 2, IPS = 1, IRS = 0, ILP = 1
ICP = [1]
NTST= 20, NCOL= 4, IAD = 3, ISP = 2, ISW = 1, IPLT= 0, NBC= 0, NINT= 0
NMX= 0, NPR= 0, MXBF= 10, IID = 2, ITMX= 9, ITNW= 5, NWTN= 3, JAC= 0
EPSL= 1e-07, EPSU = 1e-07, EPSS = 1e-05
DS = 0.01, DSMIN= 0.005, DSMAX= 0.1, IADS= 1
NPAR= 36, THL = {}, THU = {}
RLO=-1.7976e+308, RL1=1.7976e+308, A0=-1.7976e+308, A1=1.7976e+308,
UZR = {}, UZSTOP = {}, SP = [], STOP = []
IIS = 3, IBR=0, LAB=0, TY=''
NUNSTAB = -1, NSTAB = -1, IEQUIB = 1, ITWIST = 0, ISTART = 5
IREV = [], IFIXED = [], IPSI = []
```

Figura 5.1: Archivo genérico de constantes c.xxx para AUTO.

Constantes del problema

- *NDIM*. Dimensión del sistema de ecuaciones.
- *NBC*. Número de condiciones de frontera.
- *NINT*. Número de condiciones integrales.
- *NPAR*. Máximo número de parámetros que se usan, tanto de continuación como libres para guardar medidas de solución .
- *JAC*. Indica dónde las derivadas se aportan externamente o se obtienen por diferenciación ($JAC = 0$).

Constantes de discretización

- *NTST*. Número de intervalos del mallado, que se mantiene fijo en cada ejecución. Se recomienda que sea lo más pequeño posible manteniendo la convergencia.
- *NCOL*. Número de puntos de colocación por punto del mallado. Se recomienda $NCOL = 4$.
- *IAD*. Controla la adaptación del mallado. Con $IAD = 0$ se mantiene fijo, con $IAD > 0$ adapta el mallado cada IAD pasos sobre la familia que éste calculando.

Constantes de tolerancias

- *EPSL*. Criterio de convergencia relativa para los parámetros de la ecuación en el método de Newton.
- *EPSU*. Criterio de convergencia relativa para los componentes de la solución en el método de Newton.
- *EPSS*. Criterio de convergencia relativa de la longitud de arco para la detección de soluciones especiales. Por lo general, *EPSS* debe ser aproximadamente $10^{-2} - 10^{-3}$ veces el valor de *EPSL*, *EPSU*.
- *ITMX*. Número máximo de iteraciones permitidas para localizar soluciones especiales.
- *NWTN*. Después de *NWTN* iteraciones el jacobiano se fija.

Constantes de paso de continuación

- *DS*. Define el tamaño del paso de pseudo-longitud de arco que se usa en primer lugar en el cálculo de cualquier familia.
- *DSMIN*. Mínimo valor absoluto permitido para el tamaño del paso de pseudo-longitud de arco.
- *DSMAX*. Máximo valor absoluto permitido para el tamaño del paso de pseudo-longitud de arco.
- *IADS*. Controla la frecuencia con la que se adapta el paso de continuación, cada tantos *IADS* pasos.
- *THL*. Define los parámetros cuyos pesos se deben modificar en la continuación de pseudo-arco, por lo que no todos los parámetros cambian igual.

Constantes de límites de continuación

- *STOP*. Criterios de parada.
- *NMX*. Máximo número de pasos sobre cualquier familia calculada.
- *RLO*. Cota inferior para el parámetro de continuación principal.
- *RL1*. Cota superior para el parámetro de continuación principal.
- *AO*. Cota inferior para la "medida de solución" principal.
- *A1*. Cota superior para la "medida de solución" principal.

Parámetros libres

El array *ICP* designa los parámetros libres del problema. Los parámetros que deben aparecer primero son los parámetros principales de continuación. Por ejemplo, consideramos el caso de continuación se una solución al sistema $f(u, p) = 0$ en el que solo hay un parámetro libre. En este caso $ICP = [1]$, por lo que la variable *PAR*(1) se designa a dicho parámetro libre. Otro caso común es la continuación de una familia de órbitas periódicas, en la que también existe un parámetro libre. En este caso se ajusta $ICP = [1, 11]$ debido a que AUTO reserva la variable *PAR*(11) para almacenar el periodo de la solución. Cuando éste no se especifica, AUTO lo calcula pero no lo guarda. Otros casos posibles para la continuación de familias de más tipos se encuentran en el manual de AUTO.

Constantes de cálculo

- *ILP*. Controla la detección de pliegues. Con $ILP = 1$ se detectan.
- *ISP*. Controla la detección de bifurcaciones Hopf, el cálculo de los multiplicadores de Floquet, continuación de soluciones periódicas, etc.
- *ISW*. Controla la rama que se va continuar, de forma que cambiando *ISW* se buscan diferentes ramas.
- *s*. Existe la posibilidad de comenzar la continuación a partir de un archivo de continuación previo, cuyo nombre se especifica en esta parámetro. El archivo es **s.xxx**.
- *IRS*. Esta constante selecciona la etiqueta de la solución a partir de la que se puede comenzar una nueva ejecución de la continuación. En la primera continuación, al no haber datos previos, $IRS = 0$.
- *IPS*. Es una de las constantes más importantes, le indica a AUTO qué tipo de problema se resuelve. Las más usadas son las siguientes: $IPS = 0$ para problemas de bifurcaciones algebraicos, $IPS = 1$ para soluciones estacionarias de ODE con detección de Hopf, $IPS = 2$ para continuar soluciones periódicas a partir de un punto de bifurcación de Hopf (detectado previamente), y $IPS = 4$ para problemas de condiciones de frontera.

Constantes de control de salida

- *NPR*. Guarda los datos cada *NPR* puntos en la continuación.
- *IBR*. Esta constante especifica la rama inicial que se emplea. Con $IBR = 0$ se hace automáticamente.
- *LAB*. Especifica la etiqueta inicial *LAB* que se emplea.
- *UZR*. Permite al usuario definir puntos concretos al terminar la ejecución por si éstos no han sido detectados. También se puede finalizar la ejecución en estos puntos.
- *UZSTOP*. Para terminar el proceso si se encuentra algún punto de solución concreto en un parámetro.

5.2.3. Archivo xxx.auto y ejecución

Este archivo es la interfaz principal del software, escrita en el lenguaje Python. Por este motivo, AUTO también admite archivos de tipo **xxx.py**. En este archivo se especifican las ejecuciones de la continuación, llamando a los archivos anteriores. Se trata un script que se llama desde la terminal de Unix para ejecutar el software, empleando el comando **auto xxx.auto**, en el directorio en el que se encuentre el archivo. En este directorio, además, deben encontrarse los archivos **xxx.f90** y **c.xxx**.

En primer lugar, este script debe contener un objeto al que se asigna el archivo que define el problema, de forma que **a='xxx'**. En este objeto se guarda el archivo **xxx.f90**. Para empezar una ejecución, se puede asignar al mismo objeto el comando **run()**, especificando también las constantes del problema. En segundo lugar se escribe el comando **a=run(a,c='xxx')**. Una vez ejecutado, en el objeto **a** queda guardada una estructura de diagrama de bifurcaciones. Para ejecutar más procesos de continuación, basta sumar al objeto **a** nuevas ejecuciones, incluso especificando nuevas constantes si fuera necesario, sin la necesidad de especificar un nuevo archivo de constantes. Por ejemplo, si se quiere comenzar la nueva continuación desde un punto concreto de la anterior ejecución, sea el punto con la etiqueta 10, basta indicar en el siguiente comando: **a=a+run(a, IRS=10)**.

Otros comandos que se emplean con frecuencia son los siguientes:

- *save*. Guarda los datos almacenados en el objeto. Con **save(a,'xxx')** AUTO guarda el diagrama de bifurcaciones en el archivo **b.xxx**, **s.xxx** y **d.xxx**. El primero contiene el diagrama de bifurcaciones, el segundo las soluciones y el tercero los diagnósticos. Si el objeto **a** no contiene un diagrama de bifurcaciones o datos de diagnóstico, solo se guarda el archivo **s.xxx**.
- *a.writeRawFilename*. Con el comando **a.writeRawFilename('xxx.dat')** se guarda un archivo con todas las variables guardadas en *PAR*, tanto parámetros de continuación como medidas de solución.
- *plot*. Gráfico de la continuación, las soluciones y las "medidas de solución". Con **plot(a)** se ejecuta la interfaz gráfica de AUTO. Tiene la posibilidad de obtener gráficas tanto del diagrama de bifurcaciones como de la solución.

5.3. Salidas del software

Una vez ejecutado el programa, en la ventana de la terminal aparece una impresión como la de la Figura 5.2. Se trata de una serie de columnas que indican como transcurre el proceso de continuación. La primera columna *BR* indica la rama; la segunda *PT* se trata de un punto en la rama, bien el punto número *NPR* (ver las constantes) o bien un punto especial de bifurcación, la tercera *TY* indica qué tipo de punto de punto se trata (ver las posibles etiquetas en la Figura 5.3), y las demás indican las variables guardadas en *PAR*.

Una vez completada la ejecución, se guardan varios archivos de salida. Si se han indicado con los comandos **save** o **a.writeRawFilename**, se guardarán los archivos correspondientes. Además, salen tres archivos más, denominados **fort.7**, **fort.8** y **fort.9**.

- **fort.7:** Contiene el diagrama de bifurcaciones, en el que cada línea es una solución encontrada.
- **fort.8:** Contiene información gráfica y los puntos etiquetados sobre los que iniciar una nueva ejecución.
- **fort.9:** Contiene mensajes de diagnóstico, convergencia, residuos, autovalores y multiplicadores de Floquet para soluciones periódicas, indicando si son estables o inestables. La cantidad de información en este archivo se controla con el parámetro *IID*.

BR	PT	TY	LAB	pert	L2-NORM	PERIOD	r	Pr	theta	Ptheta	Energia
2	50		4	-3.68251E-16	6.49077E+00	8.57883E+02	5.67945E+00	-7.07307E-04	3.20695E+00	1.44610E-02	4.28151E-03
2	100		5	1.20210E-16	6.48762E+00	8.32883E+02	5.67535E+00	-1.79752E-03	3.24355E+00	2.35144E-02	4.28240E-03
2	150		6	5.53754E-17	6.48449E+00	8.07883E+02	5.67133E+00	-2.96885E-03	3.26979E+00	3.08399E-02	4.28420E-03
2	200		7	-1.19996E-16	6.48131E+00	7.82883E+02	5.66732E+00	-4.25517E-03	3.29170E+00	3.77023E-02	4.28710E-03
2	250		8	8.94348E-17	6.47801E+00	7.57883E+02	5.66324E+00	-5.68687E-03	3.31132E+00	4.45480E-02	4.29136E-03
2	300		9	1.74437E-17	6.47455E+00	7.32883E+02	5.65903E+00	-7.28797E-03	3.32966E+00	5.16242E-02	4.29732E-03
2	350		10	-9.18111E-17	6.47086E+00	7.07883E+02	5.65466E+00	-9.04968E-03	3.34729E+00	5.91003E-02	4.30540E-03
2	400		11	6.35867E-17	6.46689E+00	6.82883E+02	5.65014E+00	-1.07154E-02	3.36459E+00	6.70390E-02	4.31577E-03
2	450		12	2.84194E-15	6.46686E+00	6.57883E+02	5.65653E+00	4.02909E-02	3.36584E+00	5.56554E-02	4.34181E-03
2	453	BP	13	2.30064E-09	6.46949E+00	6.56832E+02	5.66106E+00	5.69301E-02	3.35830E+00	4.90990E-02	4.38663E-03

Figura 5.2: Impresión en pantalla durante una ejecución de AUTO.

Type	Short Name	Number
No Label	No Label	
Branch point (algebraic problem)	BP	1
Fold (algebraic problem)	LP	2
Hopf bifurcation (algebraic problem)	HB	3
Regular point (every NPR steps)	RG	4
User requested point	UZ	-4
Fold (ODE)	LP	5
Bifurcation point (ODE)	BP	6
Period doubling bifurcation (ODE)	PD	7
Bifurcation to invariant torus (ODE)	TR	8
Normal begin or end	EP	9
Abnormal termination	MX	-9

Figura 5.3: Etiquetas asociadas a puntos especiales en la columna *TY* de la impresión en pantalla. Tomada de [35].

Capítulo 6

Dinámica vibracional de la molécula KCN

En este capítulo se describe desde el punto de vista de la formulación hamiltoniana la dinámica vibracional de la molécula KCN con 2 grados de libertad. Se emplea un modelo realista por la precisión con la que se conoce la energía potencial a partir del trabajo de Borondo et al. [14]. Este potencial presenta un punto de silla sobre la configuración lineal CN-K, que se describe a continuación. La estructura del espacio de fases sobre este punto a medida que aumenta la energía fue detallada por Borondo et al. [13] a través de las secciones de Poincaré. Debido a la riqueza no lineal que presenta su dinámica, el estudio de la estabilidad de sus órbitas periódicas genera interés desde el punto de vista matemático y de la continuación numérica. Además, presenta una estrecha relación con un sistema mecánico clásico, el péndulo-muelle.

Las moléculas son sistemas físicos microscópicos en los que un conjunto limitado de átomos se unen entre sí mediante fuerzas. De forma experimental, sus propiedades pueden conocerse a través de su interacción con la radiación electromagnética, en lo que se denomina espectroscopía, a partir de la luz que emiten. Su estudio teórico se aborda desde los paradigmas de la Mecánica Clásica y de la Mecánica Cuántica. Son las descripciones de lo macroscópico y lo microscópico, respectivamente, y ambos formalismos son equivalentes cuando la constante de Planck tiende a cero. Los efectos cuánticos son considerables en la escala molecular, sin embargo, en el modelo más simple las fuerzas que ligan los núcleos de los átomos pueden considerarse osciladores anharmónicos, lo que motiva al estudio de su movimiento desde una perspectiva clásica. Estos movimientos constituyen la dinámica vibracional de la molécula.

6.1. Descripción hamiltoniana

La molécula que se estudia, cianuro potásico (KCN), consta de tres átomos. Se toma la posición del centro de masas de cada átomo, considerándolos como puntos, por lo que sus coordenadas cartesianas vienen dadas por $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$. El sistema consta de 9 grados de libertad, 3 por cada átomo, y las ecuaciones de Hamilton correspondientes serían 18. Mediante una serie de consideraciones físicas puede realizarse una primera aproximación a la descripción hamiltoniana de la dinámica vibracional mediante un sistema con solo 2 grados de libertad, y por tanto 4 dimensiones.

En primer lugar, hay que tener en cuenta que el movimiento puede descomponerse en traslación, rotación y vibración. Por lo tanto, el hamiltoniano puede escribirse:

$$H(x_1, \dots, x_9) = H_t(X_1, X_2, X_3) + H_{vr}(x_1, \dots, x_6) \quad (6.1)$$

donde $H_t(X_1, X_2, X_3)$ es el hamiltoniano de traslación del centro de masas, y $H_{vr}(x_1, \dots, x_6)$ es el hamiltoniano vibro-rotacional. Por lo tanto, pueden estudiarse estos movimientos por separado,

donde H_{vr} posee 6 grados de libertad. Como se ha considerado a los átomos como puntos, la molécula tiene simetría de revolución respecto del plano que forman los tres átomos. Por lo tanto, pueden emplearse las coordenadas locales sobre dicho plano, (R, r, θ) , que representan la distancia entre K y CN, la distancia entre C y N, y el ángulo que forma R con el eje que une a C y N, respectivamente. En este plano transcurriría la dinámica vibracional. Para definir la posición del plano se pueden emplear los ángulos de Euler, (ϕ, χ, ξ) , que estaría relacionado con los movimientos de rotación de la molécula. Entonces, el hamiltoniano vibro-rotacional:

$$H_{vr} = H_v(x_1, \dots, x_6) = H_v(R, r, \theta) + H'_{vr}(R, r, \theta, \phi, \chi, \xi) \quad (6.2)$$

Los movimientos puramente vibracionales del sistema pueden congelarse en un plano, tal que no exista rotación $H'_{vr} = 0$. En Mecánica Cuántica se diría que el sistema se encuentra en el estado fundamental de rotación. En estas condiciones se han reducido a 3 los grados de libertad.

Una aproximación más puede realizarse teniendo en cuenta las características de las fuerzas interatómicas. El enlace entre $C \equiv N$ es covalente triple, luego es mucho más fuerte que los enlaces con el átomo K, que es iónico. Esto implica que el movimiento de K respecto al conjunto CN, tendrá una mayor frecuencia que el movimiento entre C y N. Por lo tanto, estos movimientos pueden desacoplarse y congelar la distancia entre C y N a su distancia en el estado fundamental, denotada por $r = r_{eq}$. Se obtiene entonces un sistema con 2 grados de libertad, dados por las coordenadas canónicas (R, θ) , y con 4 dimensiones: $(R, P_R, \theta, P_\theta)$. Su representación geométrica se recoge en la Figura 6.1. Así expresado el sistema es análogo a un modelo de péndulo-muelle.

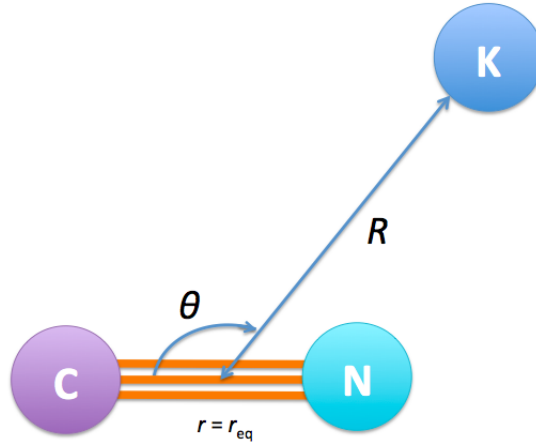


Figura 6.1: Modelo de molécula KCN para el estudio de la dinámica vibracional. Tiene 2 grados de libertad dados por R y θ . Notar que la configuración K-CN se representa por $\theta = 0$ y la configuración CN-K por $\theta = \pi$.

A continuación se formula el hamiltoniano $H(R, P_R, \theta, P_\theta)$. Como consideramos un sistema aislado en ausencia de fuerzas externas se trata de un sistema conservativo y por tanto la energía $E = H(R, P_R, \theta, P_\theta)$ es una constante de movimiento. Entonces la energía es la suma de la energía cinética y la energía potencial, donde la primera es una forma cuadrática de los momentos conjugados radial y angular, y la energía potencial solo depende de las coordenadas canónicas [25, 26]. Toma la expresión [13]:

$$E = H(R, P_R, \theta, P_\theta) = \frac{P_R^2}{2\mu_1} + \left(\frac{1}{\mu_1 R^2} + \frac{1}{\mu_2 r_{eq}^2} \right) \frac{P_\theta^2}{2} + V(R, \theta) \quad (6.3)$$

donde μ_1 es la masa reducida de K y CN y μ_2 la masa reducida del conjunto CN:

$$\mu_1 = \frac{m_K(m_C + m_N)}{m_K + m_C + m_N}, \quad \mu_2 = \frac{m_C m_N}{m_C + m_N} \quad (6.4)$$

Se puede notar que existe una singularidad para $R = 0$, de forma que K nunca puede encontrarse en el punto intermedio entre C y N. Esto expresa el hecho de que la molécula no puede comprimirse. La causa de la riqueza dinámica del sistema radica en la forma de la energía potencial:

$$V(R, \theta) = \sum_{n=0}^{n_{\text{máx}}} \sum_{m=0}^{m_{\text{máx}}} C_{n,m} \cos(m\theta) \left[1 - e^{-\alpha(R-R_0)}\right]^n \quad (6.5)$$

donde $\{C_{nm}\}$ son coeficientes calculados *ab initio*. Borondo et al. [14] realizaron un cálculo preciso de estos coeficientes, con $n_{\text{máx}} = 5$ y $m_{\text{máx}} = 18$. Los parámetros α y R_0 no lineales son característicos para el sistema KCN, también ajustados *ab initio*. Son parámetros positivos, $\alpha, R_0 > 0$; los coeficientes del desarrollo $\{C_{nm}\}$ son tanto positivos como negativos. Las ecuaciones de Hamilton del sistema se expresan como:

$$\begin{cases} \dot{R} &= \frac{P_R}{\mu_1} \\ \dot{P}_R &= \frac{P_\theta^2}{\mu_1 R^3} - \sum_{n=1}^{n_{\text{máx}}} \sum_{m=0}^{m_{\text{máx}}} n C_{nm} \cos(m\theta) \alpha e^{-\alpha(R-R_0)} \left[1 - e^{-\alpha(R-R_0)}\right]^{n-1} \\ \dot{\theta} &= \left(\frac{1}{\mu_1 R^2} + \frac{1}{\mu_2 r_{eq}^2} \right) P_\theta^2 \\ \dot{P}_\theta &= \sum_{n=0}^{n_{\text{máx}}} \sum_{m=1}^{m_{\text{máx}}} m C_{nm} \sin(m\theta) \left[1 - e^{-\alpha(R-R_0)}\right]^n \end{cases} \quad (6.6)$$

El estudio que se realiza de la dinámica vibracional de la molécula KCN tiene como objetivo obtener un diagrama de continuación-bifurcación, deduciendo la estabilidad de las familias de soluciones periódicas del sistema (6.6) a través de los multiplicadores de Floquet. Para visualizar el espacio de fases se utiliza la sección de Poincaré, que en este caso es un plano.

6.2. Sección de Poincaré y la configuración lineal CN-K

Como tiene 4 dimensiones, para construir la sección de Poincaré se utiliza la energía del sistema E para reducir una dimensión. Se toma el momento conjugado radial:

$$|P_R| = \sqrt{2\mu_1 \left(E - \left(\frac{1}{\mu_1 R^2} + \frac{1}{\mu_2 r_{eq}^2} \right) \frac{P_\theta^2}{2} + V(R, \theta) \right)} \quad (6.7)$$

por lo que la información de las órbitas está en un subespacio de 3 dimensiones. El plano de corte de la sección de Poincaré suele tomarse por convenio el camino de mínima energía (MEP, por *minimum path energy*), que es la curva sobre la superficie potencial $V(R, \theta)$ que hace que $V = V(R, \theta)$ sea mínimo, y se parametriza como $R = R_{eq}(\theta)$. Se representa en la Figura 6.2. La expresión para $R_{eq}(\theta)$ se da en [14] a través del ajuste de la serie de Fourier:

$$R_{eq}(\theta) = \sum_{k=0}^{k_{\text{máx}}} a_k \cos(k\theta) \quad (6.8)$$

Los coeficientes $\{a_k\}$ se han calculado también *ab initio*, con $k_{\text{máx}} = 9$. Como se trata de la energía mínima, las órbitas siempre tienden a pasar por esta parte del espacio de fases, luego es una elección razonable para la sección de Poincaré. Por lo tanto, el plano en el que se visualiza la sección de Poincaré es P_θ frente a θ . Como no se trata de una superficie constante, es necesario realizar una transformación de las variables para que conserve el área [19]. En este trabajo se han obtenido secciones de Poincaré propias, aunque menos precisas. No se ha realizado dicha transformación, pero se pueden relacionar cualitativamente con las de [13].

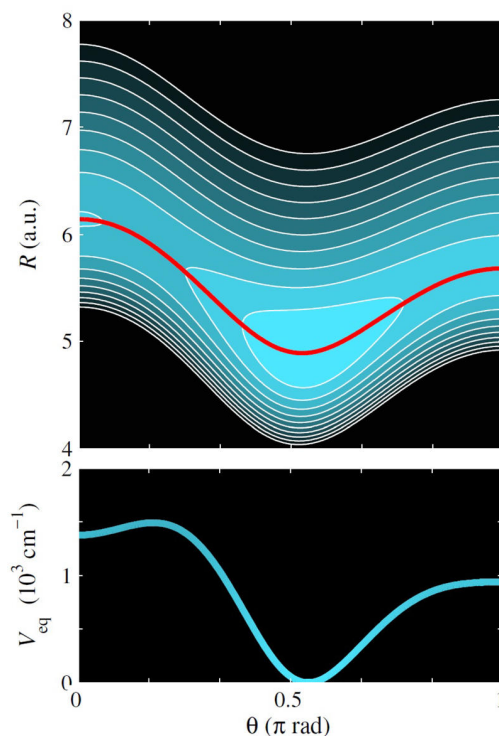


Figura 6.2: Arriba, superficie potencial para la molécula KCN, representado en rojo el MEP (camino de mínima energía). Abajo, el perfil del potencial sobre el MEP. La configuración lineal CN-K tiene energía potencial 940 cm^{-1} , que corresponde con $H(R_{eq}, 0, \theta, 0)$. Se observa en estas coordenadas que el potencial presenta un punto de silla. Tomada de [13].

La región de interés del espacio de fases empieza con punto de equilibrio en la configuración lineal CN-K, de coordenadas $(R_{eq}(\pi), 0, \pi, 0)$. Esta configuración lineal se corresponde en la Figura 6.1 con aquella en la que los tres átomos descansan sobre la misma recta, con K próximo a N. En esta configuración, el potencial presenta un punto de silla, lo que se pone de manifiesto en las soluciones como se aprecia en la Figura 6.3. A partir de cierto punto se vuelve estable, creando una región ordenada a su alrededor, dentro del mar caótico (estructura KAM). Al aumentar la energía, se suceden bifurcaciones sub-armónicas, y la estabilidad finalmente se pierde a través de una bifurcación de duplicación de periodo [13].

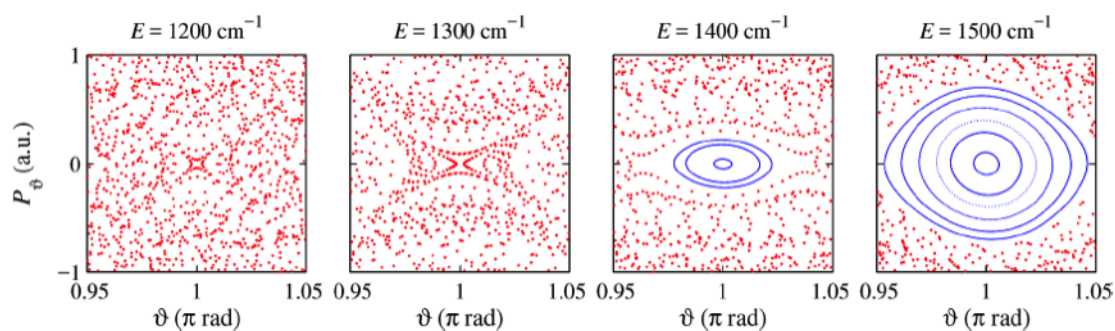


Figura 6.3: Secciones de Poincaré para varias energías en la configuración lineal CN-K en la vecindad de $\theta = \pi$. Tomada de [13].

6.3. Relación con el péndulo-muelle

El péndulo muelle es un sistema mecánico compuesto por una masa que cuelga de un muelle, como un péndulo de longitud variable, cuyo origen está fijo en un punto y su movimiento se debe a la acción de la gravedad. Sus movimientos son de libración o rotación entorno al punto del que cuelga, y de recuperación o elongación elástica a través del muelle. Debido a que el modelo estudiado de la molécula KCN puede describirse a través de las coordenadas polares (R, θ) , donde hay una componente radial que oscila respecto al origen y una componente angular, en definitiva, un péndulo-muelle es un modelo que simplifica al que se ha estudiado. Un esquema de este modelo puede verse en la Figura 6.4, en la que puede verse la similitud del esquema con el de la molécula KCN, en la Figura 6.1. El péndulo-muelle tiene como punto de equilibrio la posición de cuelgue, en la que éste está paralelo a la dirección de la gravedad y no se mueve. Este mismo equilibrio es el que ocurre en la configuración lineal CN-K que se estudia. La diferencia fundamental entre estos dos sistemas se encuentra en el potencial de la molécula KCN. Si atendemos a la forma del hamiltoniano del péndulo-muelle [10]:

$$H = \frac{1}{2m} \left(P_R^2 + \frac{P_\theta^2}{R^2} \right) + V'(R, \theta) \quad (6.9)$$

con la expresión del potencial:

$$V'(R, \theta) = \frac{k}{2}(R - R_0)^2 - mgR \cos \theta \quad (6.10)$$

donde m es la masa que cuelga, k la constante de recuperación del muelle, g la constante de gravedad y R_0 la distancia en reposo del muelle. Las tres son constantes positivas del problema, Se puede apreciar como los dos primeros términos corresponden con la energía cinética del sistema, por ser una función cuadrática en las velocidades, y tienen la misma forma que los términos en el hamiltoniano de KCN en (6.3). El potencial V' también es solo función de las coordenadas, y se aprecia que la no linealidad se presenta como un término $R \cos \theta$. En el potencial de KCN, en (6.5), la no linealidad es una serie de Fourier de cosenos por exponencial elevada a potencia. Vamos a tratar de encontrar el potencial del péndulo-muelle dentro del potencial del sistema KCN. Para ello, puede realizarse una aproximación lineal de la exponencial, a partir del desarrollo de Taylor y truncando en primer orden:

$$e^{-\alpha(R-R_0)} = 1 - \alpha(R - R_0) + O(\alpha^2(R - R_0)^2)$$

Entonces, los términos $\{n, m\}$ del potencial KCN en la aproximación de primer orden:

$$C_{nm} \cos(m\theta) \left[1 - e^{-\alpha(R-R_0)} \right]^n \simeq C_{nm} \cos(m\theta) [\alpha(R - R_0)]^n \quad (6.11)$$

En estas condiciones, podemos comparar ciertos términos de los potenciales V y V' :

- Si atendemos al término $\{n = 2, m = 0\}$ de (6.5) se obtiene que:

$$C_{20} \left[1 - e^{-\alpha(R-R_0)} \right]^2 \simeq C_{20} \alpha^2 (R - R_0)^2 \quad (6.12)$$

que toma la misma forma que el término de muelle de (6.10), porque $C_{20} > 0$ según [14].

- En el término $\{n = 1, m = 1\}$ de (6.5) se tiene que:

$$C_{11} \cos \theta \left[1 - e^{-\alpha(R-R_0)} \right] \simeq C_{11} \alpha (R - R_0) \cos \theta$$

y como $C_{11} < 0$ según [14], se deduce que:

$$C_{11} \cos \theta \left[1 - e^{-\alpha(R-R_0)} \right] \simeq -|C_{11}| \alpha (R - R_0) \cos \theta \implies -|C_{11}| \alpha R \cos \theta \quad (6.13)$$

que tiene la misma forma que el término de péndulo con longitud variable en (6.10).

Por lo tanto, el péndulo-muelle estaría implícito en el sistema molecular KCN. Esto implica que muchos resultados que se obtienen para el péndulo muelle deben observarse, de forma cualitativa, en el sistema molecular KCN. Por ejemplo, debido a la simetría de inversión $\theta \rightarrow -\theta$, que presentan ambos modelos, para el péndulo muelle se obtuvo que las resonancias 1:2 y 1:4 son las que generan un mayor cambio en la estructura del espacio de fases, seguida por una resonancia 1:6. La resonancia 1:3 se elimina debido a este tipo de simetría, y su aparición es prácticamente despreciable. Existen resonancias de orden superior, pero también tienen muy poca repercusión en comparación [10].

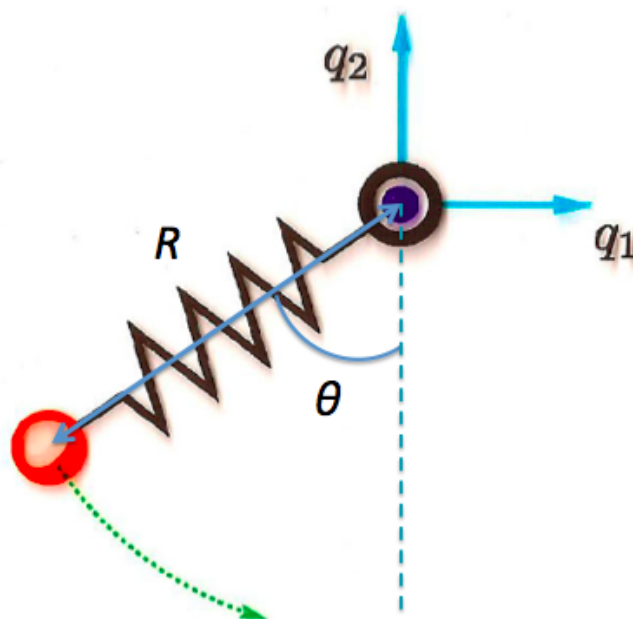


Figura 6.4: Esquema del sistema péndulo-muelle, donde el punto fijo sobre el que cuelga es el origen de un sistema cartesiano (q_1, q_2) . En un sistema de referencia en coordenadas polares, la masa (bola roja) puede describirse con las coordenadas (R, θ) . Puede notarse la similitud del esquema con el de la molécula de KCN, en la Figura 6.1. El péndulo muelle es un modelo simplificado. Tomada de [9].

6.4. Unidades empleadas

Las magnitudes utilizadas para la continuación numérica de este problema tienen escala molecular, por lo que las unidades de masa, distancia y energía se han tomado las correspondientes al sistema de unidades atómicas (u.a.), que son adimensionales. Como unidad angular se toma el radián. El tiempo en estas unidades también es adimensional. En el estudio de sistemas moleculares es común encontrar los resultados de energías en la unidad cm^{-1} , según la notación típica en espectroscopía, con la siguiente conversión:

$$E(\text{cm}^{-1}) = 219474,624 \cdot E(\text{u.a.})$$

Los cálculos se han realizado en unidades atómicas, de forma que las variables canónicas son adimensionales, y luego la energía se ha convertido a cm^{-1} .

Capítulo 7

Estudio numérico de bifurcaciones sobre el punto de silla del sistema KCN

En este capítulo se presentan todos los resultados numéricos obtenidos para el sistema molecular KCN. Se trata de un sistema hamiltoniano no integrable y cuya dinámica vibracional es caótica en general. Se ha estudiado entorno a la configuración lineal CN-K, con $\theta = \pi$, descrita en la Sección 6.1, que aparece como consecuencia del punto de silla del potencial. El principal resultado que se ha obtenido son las diferentes ramas de soluciones periódicas que emanan de este punto de equilibrio a medida que aumenta la energía. También se ha podido visualizar la estructura del espacio de fases para diferentes valores de energía a través de la sección de Poincaré, y para ello se ha programado en MATLAB. Por último, se comparan los resultados de la continuación con la estructura del espacio de fases descrita por Borondo et al. [13] y con el estudio de los multiplicadores del péndulo-muelle de Galan-Vioque et al. [9].

7.1. Resultados de la continuación numérica con AUTO

La principal aportación de este trabajo es el estudio por continuación numérica del sistema molecular KCN mediante el software AUTO. El análisis parte de la obtención del diagrama de bifurcaciones, y luego se comenta por separado, en cada rama de soluciones periódicas encontradas, el comportamiento de los multiplicadores de Floquet. Para ello se emplea el logaritmo de su módulo, $\ln |\lambda|$ (en los casos en los que los multiplicadores son pares reales recíprocos $(\lambda, 1/\lambda)$ el logaritmo del módulo es simétrico respecto a $\ln |\lambda| = 0$, con $\ln |\lambda| = -\ln |1/\lambda|$), su argumento, $\arg(\lambda)$ (en los casos en los que los multiplicadores sean pares complejos conjugados, $\arg(\lambda) = -\arg(\lambda^*)$, y se podrá comprobar cómo dan vueltas por el círculo unidad), y el índice de estabilidad, ρ . Las soluciones periódicas estables se presentan con $\ln |\lambda| = 0$ y $|\rho| \leq 2$, en caso contrario son inestables.

7.1.1. Diagrama de bifurcaciones

El resultado principal de la continuación es un esbozo del diagrama de continuación-bifurcación que se recoge en la Figura 7.1, en el que el parámetro del sistema es la energía. Las familias de soluciones periódicas vienen caracterizadas por el periodo y por la norma L^2 . Se han tomado estas dos cantidades porque son las que AUTO calcula por defecto.

Las ramas encontradas en este estudio son las siguientes: la Rama 1 en verde, la Rama 2 en rojo, la Rama 2.1 en azul, y la Rama 3 en morado. La Rama 1 (verde) disminuye rápidamente en periodo al aumentar la energía, uniéndose a la Rama 2 (roja) en un punto de bifurcación. A

medida que aumenta la energía, en la Rama 3 (morado) el periodo crece de forma continua, y no da lugar a ninguna rama adicional. De la Rama 2 (roja) sí que emana una nueva rama, la Rama 2.1 en azul, en un punto de bifurcación. Por el momento, se desconoce el alcance de las ramas a energías superiores a las obtenidas, así como otros puntos de bifurcación. A pesar de que las Ramas 2 y 2.1 queden muy cercas en periodo e incluso se solapen, AUTO no ha detectado que ocurra una nueva bifurcación en la que ambas se unen, por lo que en estas energías no se llegan a solapar. Esta circunstancia se confirma con el diagrama de la norma L^2 , en el que se observa como las Ramas 2 y 2.1 están separadas.

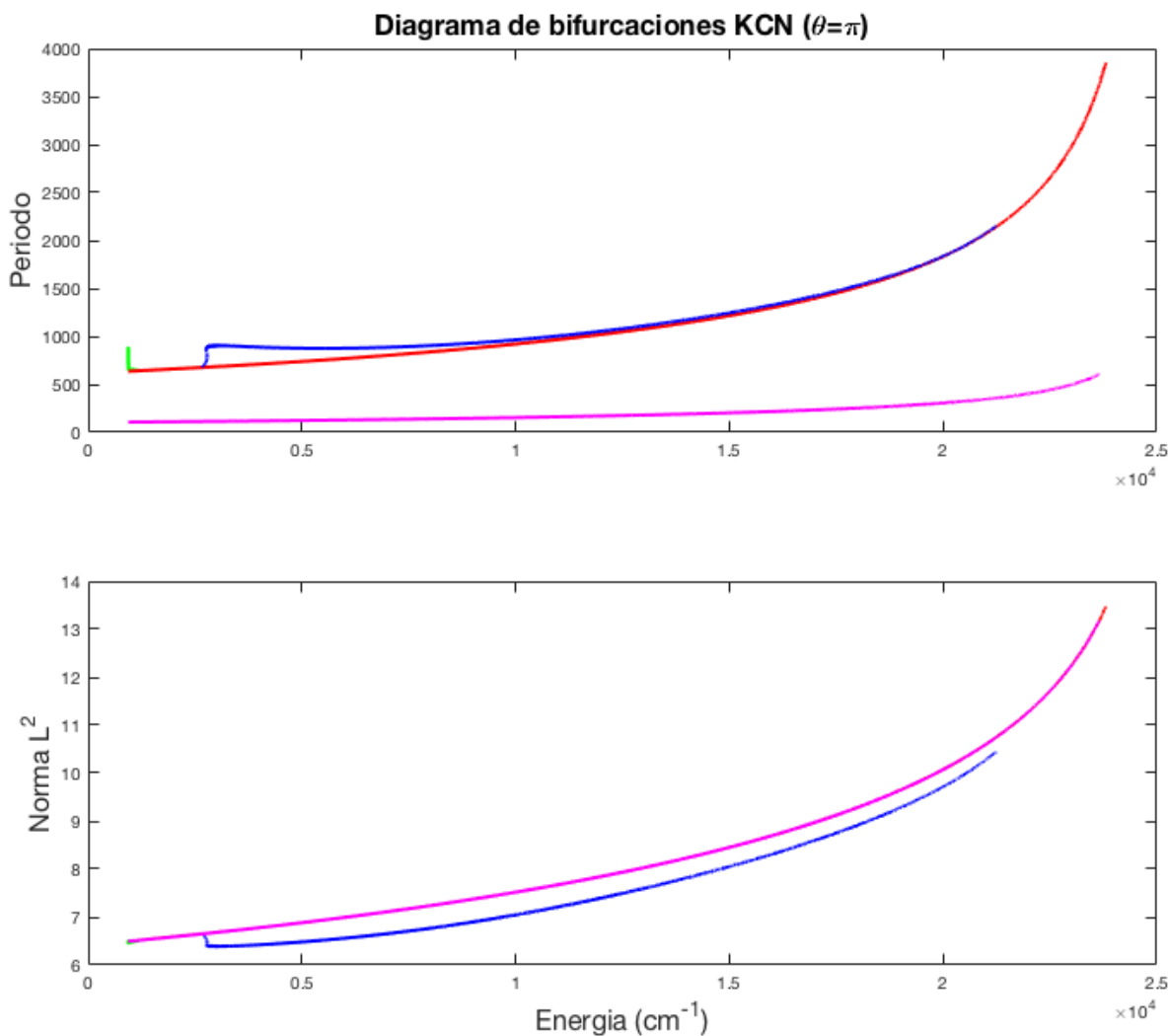


Figura 7.1: Diagrama de continuación-bifurcación entorno a la configuración lineal de la molécula KCN, $\theta = \pi$. Se utilizan dos cantidades para caracterizar a las ramas de soluciones periódicas, el periodo (arriba) y la norma L^2 (abajo). La energía del equilibrio es 940 cm^{-1} . Se aprecian cuatro ramas: la Rama 1 en verde, la Rama 2 en rojo, la Rama 2.1 en azul y la Rama 3 en morado. La Rama 1 es difícil de apreciar en el diagrama de la norma L^2 en esta escala.

La energía mínima a la que aparecen las ramas se corresponde con la energía de la configuración lineal CN-K, con $(R = R_{eq}(\pi), P_R = 0, \theta = \pi, P_\theta = 0)$, por lo que se trata de un punto de equilibrio (los momentos conjugados son nulos). Puede verse el diagrama ampliado sobre el punto de equilibrio en la Figura 7.2. En el diagrama del periodo se observa que del punto de equilibrio emanan tres ramas, que son las Ramas 1 (verde), 2 (roja) y 3 (morado). En el diagrama de la

norma L^2 las Ramas 2 y 3 quedan solapadas, tienen el mismo valor de la norma para una energía dada. Este resultado indica que se trata de soluciones resonantes: en el equilibrio, el periodo de la Rama 2 es 6 veces el periodo de la Rama 3, por lo que se trata de la misma solución, pero recorrida 6 veces. Por lo tanto, son dos ramas las que emanan del equilibrio, como predice el Teorema de Centro de Lyapunov. Por otro lado, en la Rama 1 (verde) se observan dos puntos de inflexión en el periodo, que se corresponde con un *loop* en la norma L^2 . A continuación se comentan los resultados de las ramas según los multiplicadores de Floquet y el índice de estabilidad.

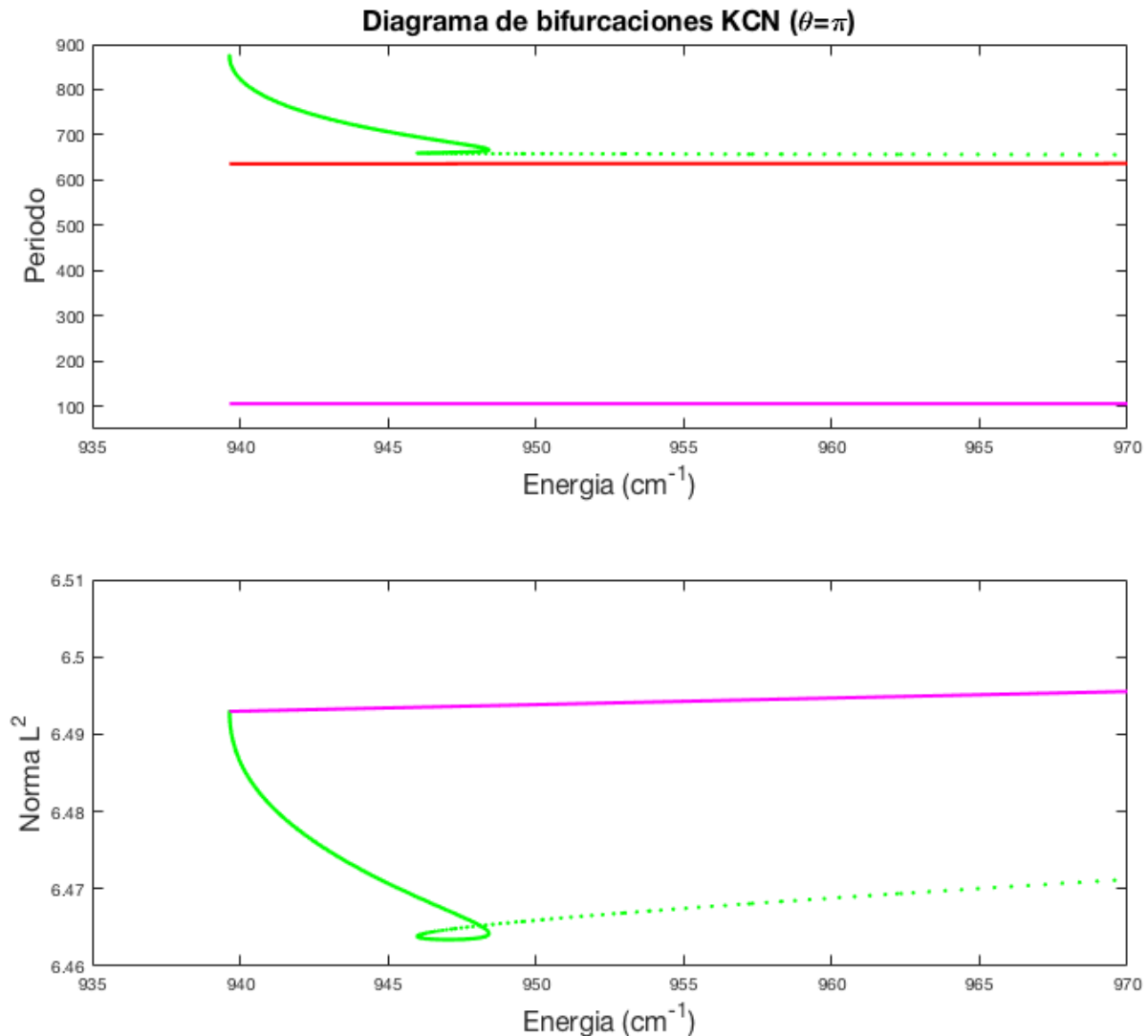


Figura 7.2: Diagrama de continuación-bifurcación entorno a la configuración lineal de la molécula KCN, $\theta = \pi$, con el periodo (arriba) y la norma L^2 (abajo) frente a la energía, ampliado sobre el punto de equilibrio, del que emanan las ramas de soluciones periódicas. Por el diagrama del periodo se aprecia que emanan 3 ramas (la 1, la 2 y la 3), sin embargo, por el diagrama de la norma L^2 se observa que la norma en las ramas 2 y 3 (roja y morado) coinciden. Notar que los puntos en la Rama 1 (verde) son los resultados de la continuación y no está relacionado con la estabilidad.

7.1.2. Rama 1

La Rama 1 (verde) se corresponde con la rama de periodo largo que emana del punto de equilibrio. Los resultados encuentran en la Figura 7.3. Se observa todo el dominio en energía para esta rama, antes de unirse a la Rama 2 (roja). Puede observarse que siempre se dan dos

multiplicadores con $\ln(|\lambda|) = 0$ y $\arg(\lambda) = 0$, que corresponden con el autovalor doble de valor 1. Esto sucede en todas las ramas encontradas, por lo que el par de multiplicadores restantes son los que tienen interés. En la Figura 7.3 se aprecia como, a partir de cierto valor de la energía, $\ln|\lambda| > 0$, y tanto $\arg(\lambda)$ como ρ dejan de oscilar. Se trata de una bifurcación splitting, debido a que antes de ese punto los multiplicadores dan vueltas por el círculo unidad para luego salir del mismo, volviéndose inestables, en una bifurcación splitting. Vamos a analizar la zona estable de forma más detenida. En la Figura 7.4 se encuentra esta región ampliada.

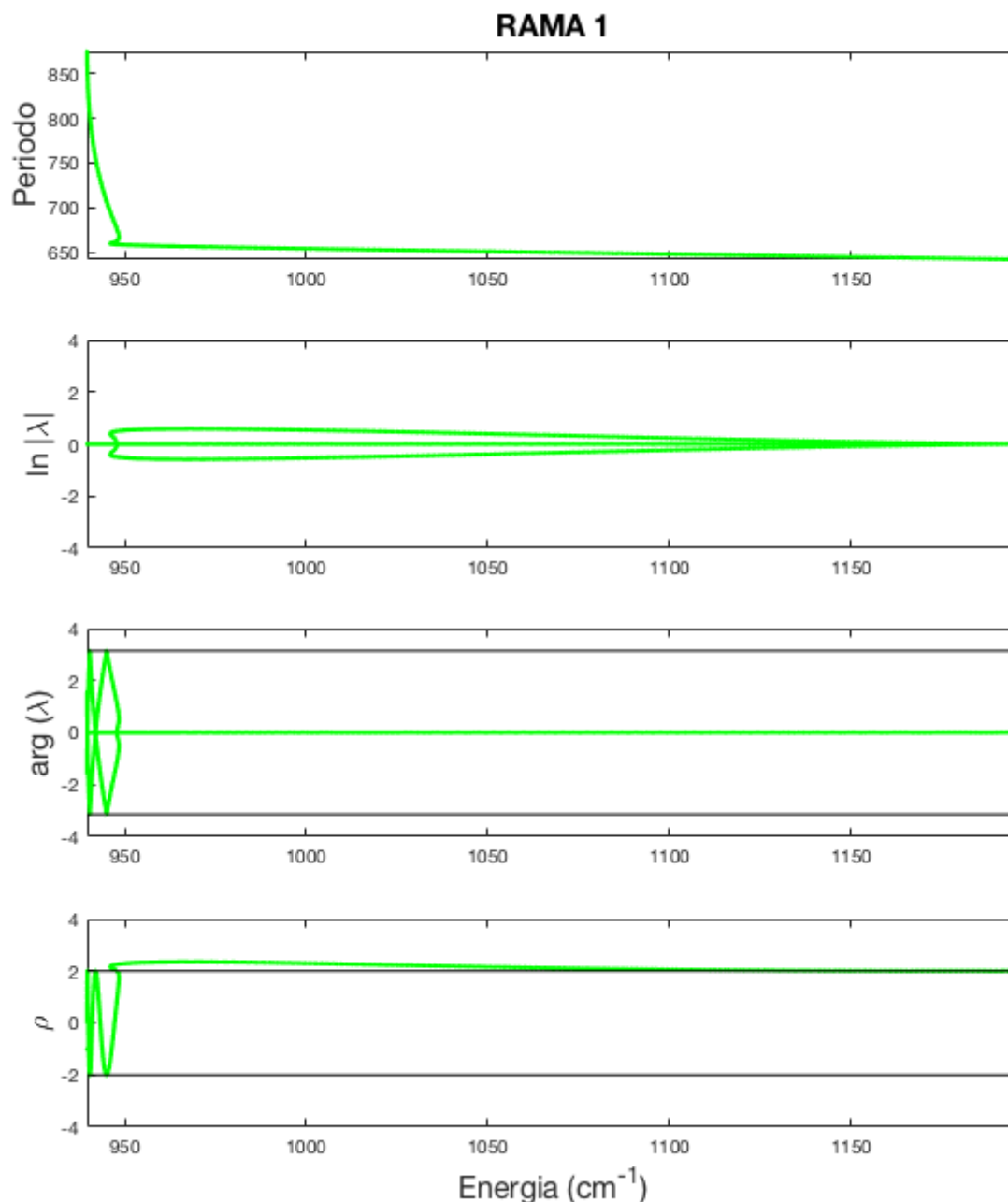


Figura 7.3: Resultados para la Rama 1 (verde) del diagrama de continuación - bifurcación de la molécula KCN de 7,1. De arriba a abajo, se aprecian las gráficas del periodo, el logaritmo del módulo de los multiplicadores, el argumento de los multiplicadores y el índice de estabilidad en función de la energía. Señalados en negro los valores $\pm\pi$ en el argumento y ± 2 en el índice.

Atendiendo al módulo y al argumento de los multiplicadores, se aprecia cómo dan vueltas por el círculo unidad desde su aparición desde el punto de equilibrio, por lo que la rama nace

estable. Se observan dos bifurcaciones tangente en las que $\arg(\lambda) = 0$, así como dos duplicaciones de periodo, en las que $\arg(\lambda) = \pi$. En estas situaciones los multiplicadores tienen valor ± 1 , respectivamente. Este resultado se corresponde con los valores del índice de estabilidad, $\rho = \pm 2$. Se trata de bifurcaciones passing, en las que no se pierde la estabilidad. Entre estos puntos se dan bifurcaciones sub-armónicas, a medida que los multiplicadores dan vueltas por el círculo unidad; éstos indican que van apareciendo las resonancias de la órbita periódica original. Finalmente la bifurcación splitting se encuentra en una bifurcación de doble 1: los multiplicadores abandonan el círculo unidad desde el punto $(1, 0)$ del plano complejo como un par recíproco real $(\lambda, 1/\lambda)$ con $\ln|\lambda| > 0$ y $\arg(\lambda) = 0$, y se alejan del punto crítico sobre el semieje positivo real. En este punto se aprecia como $\rho > 2$.

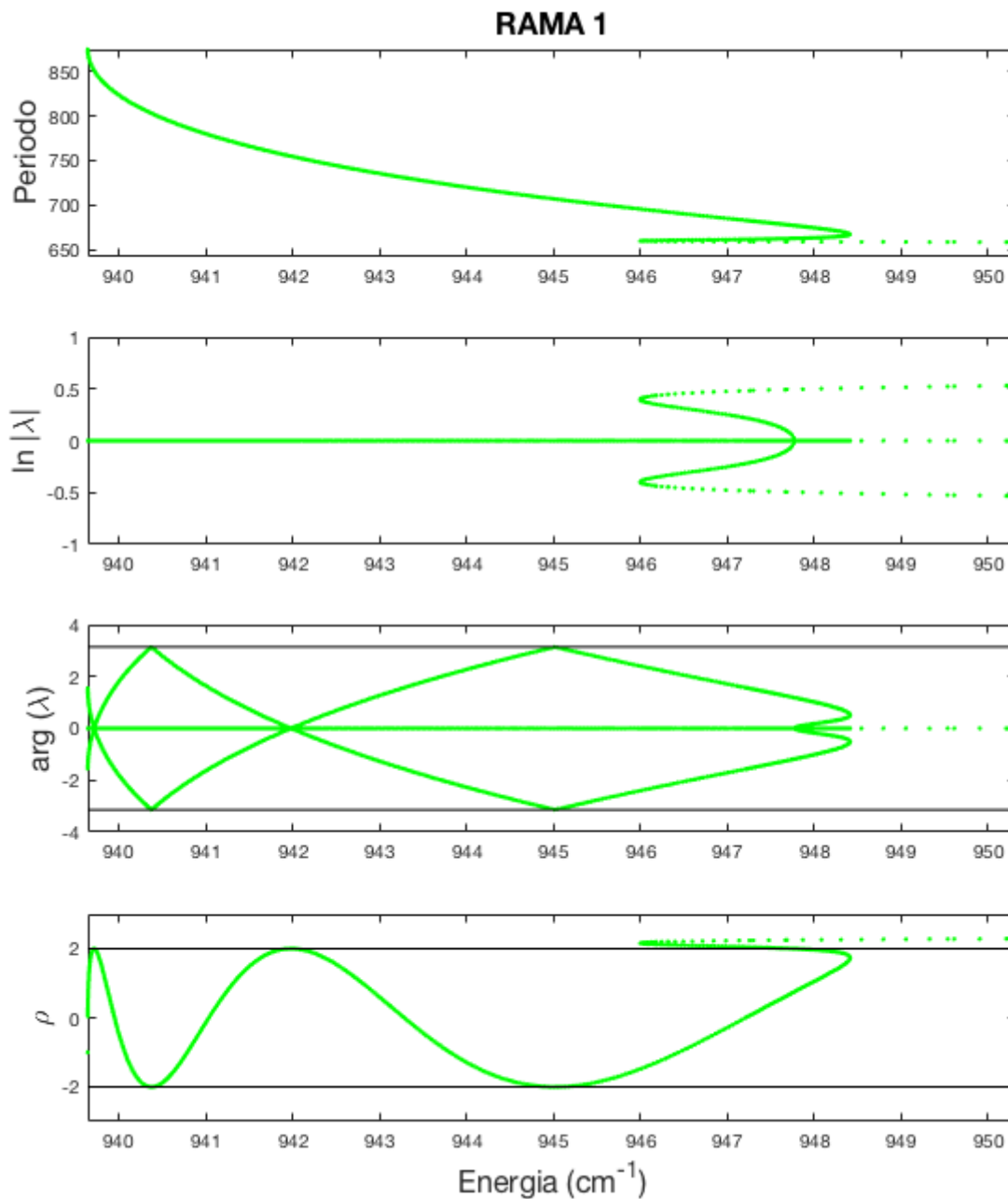


Figura 7.4: Rama 1 (verde) ampliada de la Figura 7.3. De arriba a abajo, se aprecian las gráficas del periodo, el logaritmo del módulo de los multiplicadores, el argumento de los multiplicadores y el índice de estabilidad en función de la energía. Señalados en negro los valores $\pm\pi$ en el argumento y ± 2 en el índice.

7.1.3. Rama 2

Los resultados para la Rama 2 (roja) se encuentran en la Figura 7.5 para todo el rango de energías que se ha continuado. De igual forma que con la Rama 1 (verde), la Rama 2 (roja) emana del punto de equilibrio siendo estable, y los multiplicadores dan vueltas por el círculo unidad hasta perder la estabilidad cuando $\rho > 2$. Esto indica que la frontera de la estabilidad se encuentra en una bifurcación splitting de doble 1.

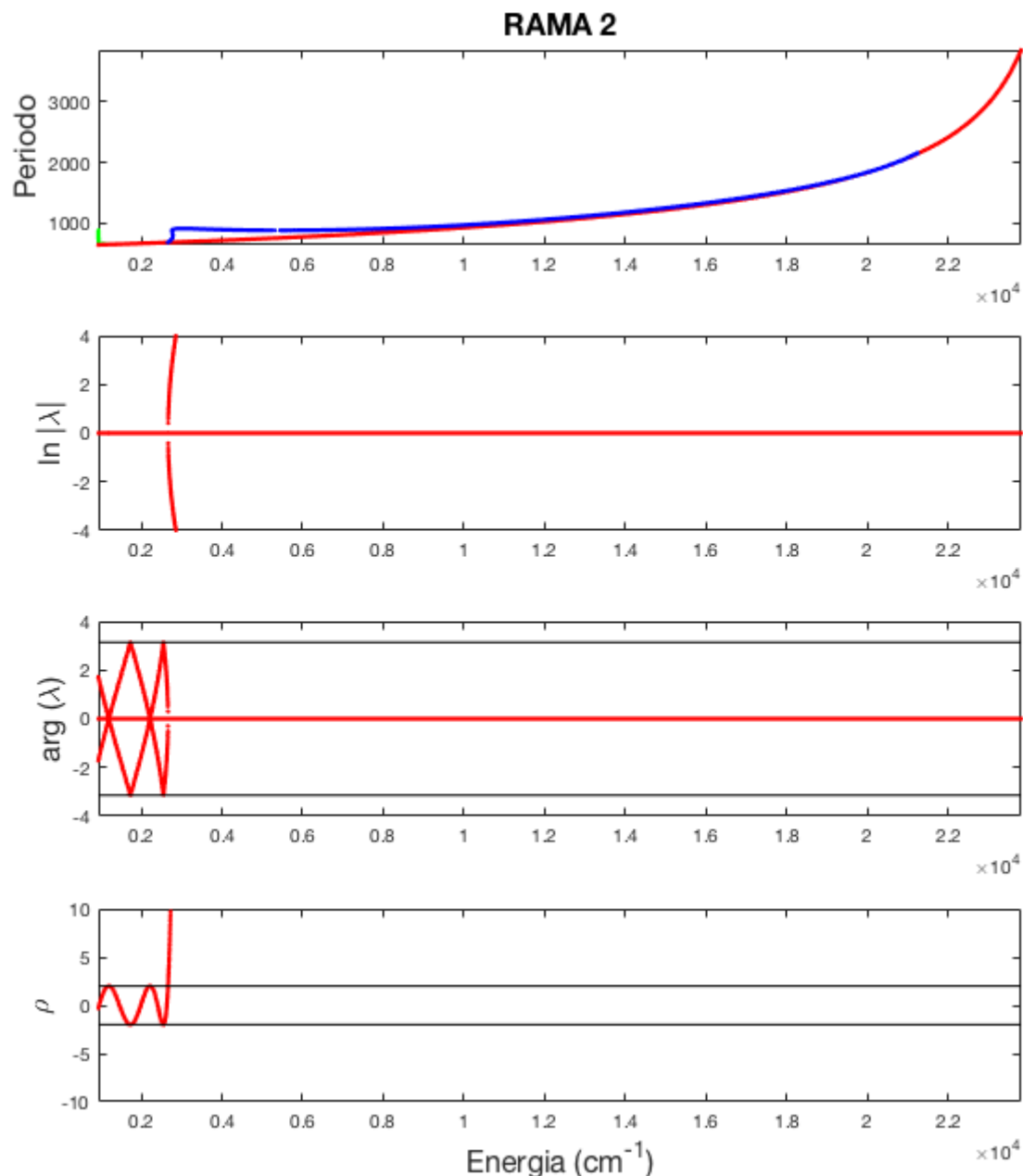


Figura 7.5: Resultados para la Rama 2 (roja) del diagrama de continuación - bifurcación de la molécula KCN de la Figura 7.1. De arriba a abajo, se aprecian las gráficas del periodo, el logaritmo del módulo de los multiplicadores, el argumento de los multiplicadores y el índice de estabilidad en función de la energía. Señalados en negro los valores $\pm\pi$ en el argumento y ± 2 en el índice.

Lo más significativo de la Rama 2 es que la bifurcación splitting es un punto de bifurcación de ramas, en el que sucede el nacimiento de la Rama 2.1 (azul). En la Figura 7.6 se amplía la región estable de la Rama 2 (roja) y puede apreciarse. Se observa que la Rama 2 (roja) atraviesa

dos bifurcaciones tangentes y dos duplicaciones de periodo, de tipo passing. En el recorrido por el círculo unidad se dan bifurcaciones sub-armónicas. En la bifurcación splitting los multiplicadores salen del círculo unidad par recíproco y se alejan del punto crítico sobre el semieje positivo real, confirmando que sucede en una bifurcación tangente. También notar en la Figura 7.6 cómo la Rama 1 (verde) se funde con la 2, en un punto de bifurcación splitting. Si atendemos a la Figura 7.4, en el final de la Rama 1 (verde) se aprecia que $\rho = 2$ y $\ln|\lambda| = 0$, por lo que se trata de una bifurcación de doble 1. En la Figura 7.6 se aprecia también que $\rho = 2$ para la Rama 2 en este punto crítico.

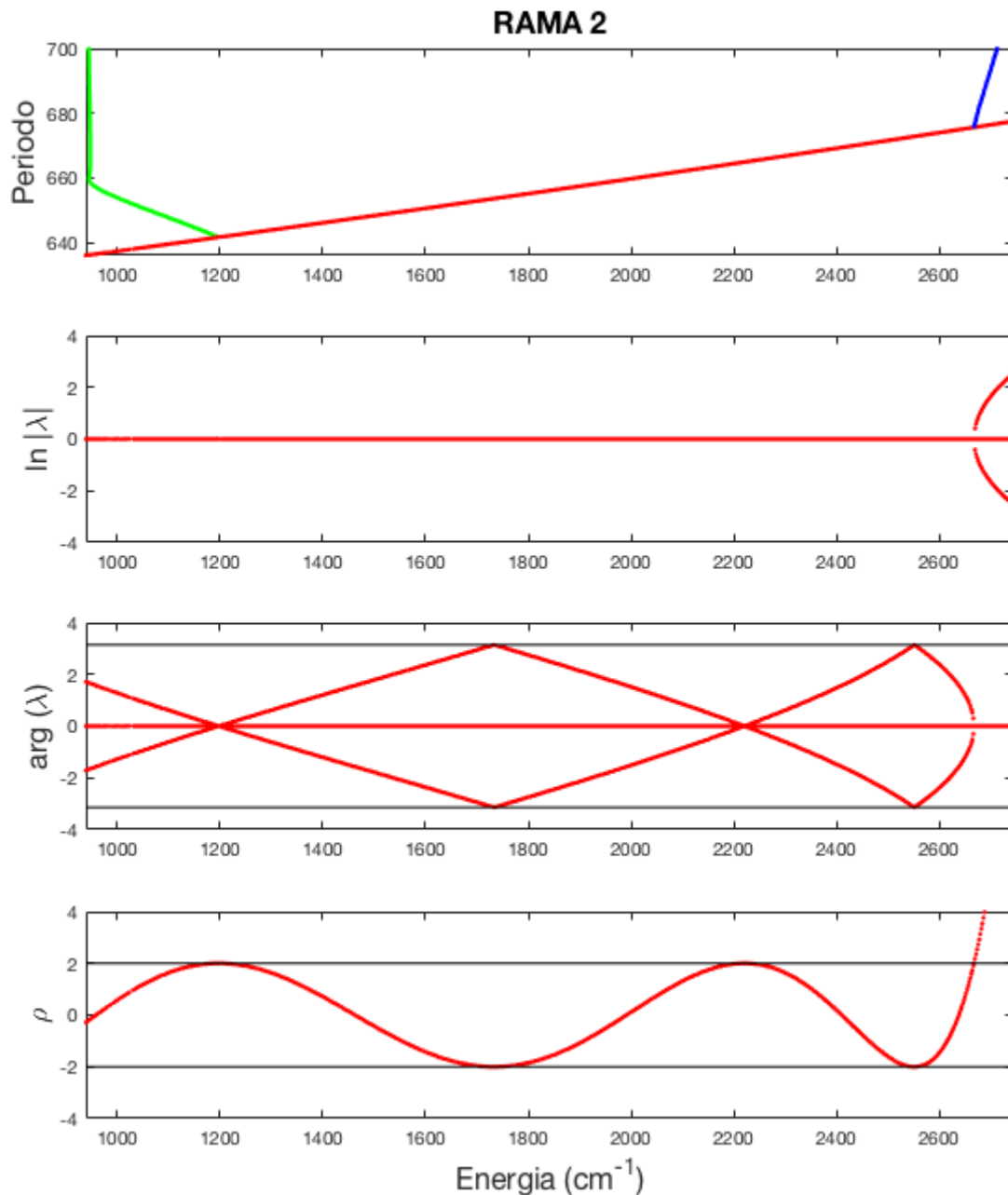


Figura 7.6: Rama 2 (roja) ampliada de la Figura 7.5. De arriba a abajo, se aprecian las gráficas del periodo, el logaritmo del módulo de los multiplicadores, el argumento de los multiplicadores y el índice de estabilidad en función de la energía. Señalados en negro los valores $\pm\pi$ en el argumento y ± 2 en el índice.

7.1.4. Rama 2.1

Los resultados para la Rama 2.1 (azul) se encuentran en la Figura 7.7. Lo más llamativo en el diagrama de bifurcaciones es que esta rama presenta un máximo y un mínimo locales respecto al periodo a medida que aumenta la energía. La Rama 2.1 nace a partir de la Rama 2, como se ha visto en la Figura 7.6, en un punto de bifurcación splitting de doble 1. Sus multiplicadores se alejan del círculo unidad por recíproco real sobre el semieje positivo real. De igual forma, la Rama 2.1 (azul) nace inestable y sus multiplicadores siguiendo un comportamiento similar. Su índice de estabilidad es $\rho = 2$ en su nacimiento y a partir de entonces este valor aumenta.

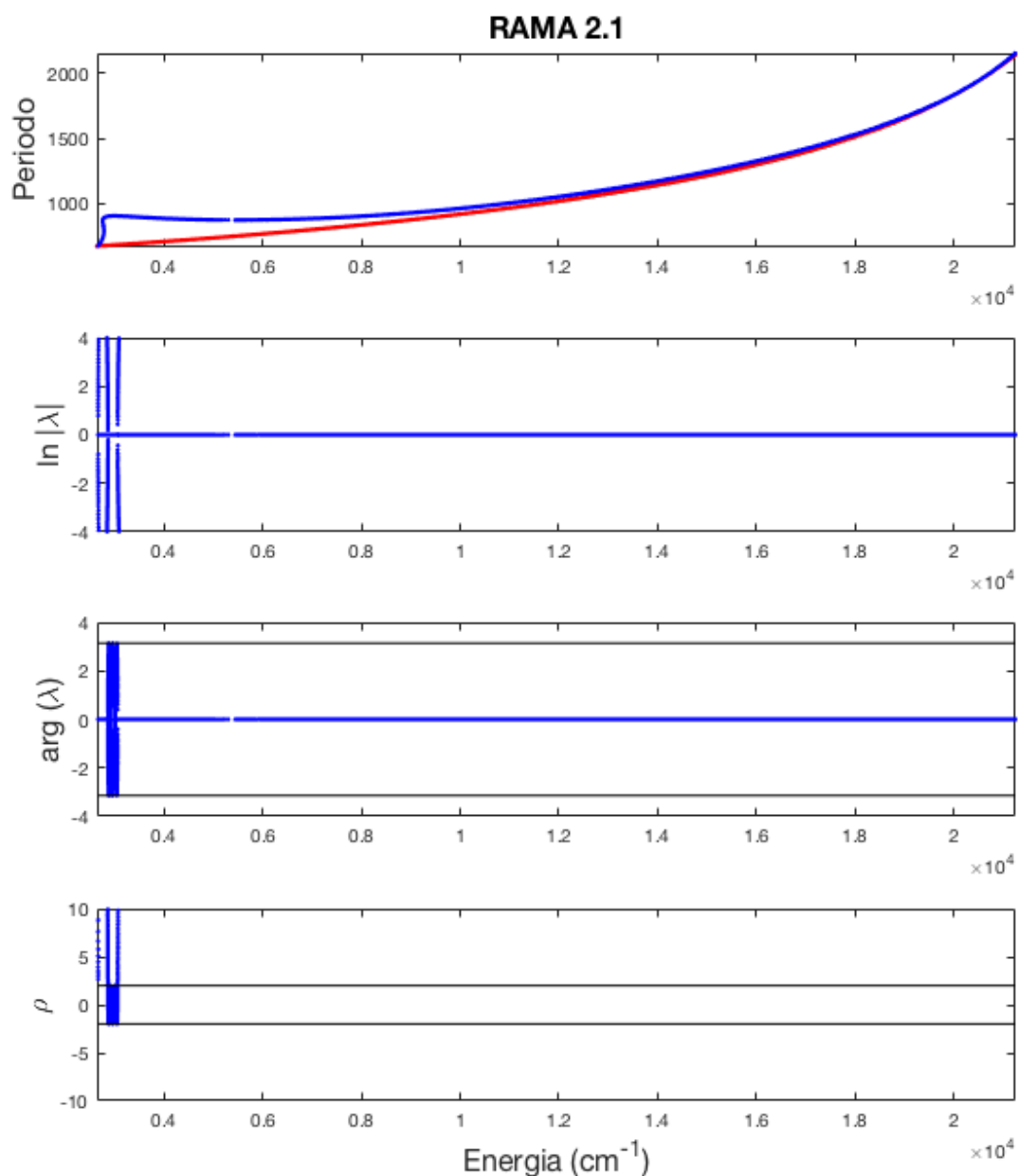


Figura 7.7: Resultados para la Rama 2.1 (azul) del diagrama de continuación-bifurcación de la molécula KCN de la Figura 7.1. De arriba a abajo, se aprecian las gráficas del periodo, el logaritmo del módulo de los multiplicadores, el argumento de los multiplicadores y el índice de estabilidad en función de la energía. Señalados en negro los valores $\pm\pi$ en el argumento y ± 2 en el índice.

Una característica peculiar de esta rama es una región de estabilidad en mitad del recorrido que se encuentra en la región del máximo de la rama en el diagrama de bifurcaciones (Figura 7.8). Haciendo el análisis sobre la posición del máximo, se ha comprobado que éste no se corresponde con una bifurcación tangente o de duplicación de periodo en esta región estable, sino que se trata de una bifurcación sub-armónica intermedia. El mínimo de la rama se encuentra en la región inestable. Atendiendo a los multiplicadores, la rama se hace estable a través de una bifurcación splitting tangente, pasa por tres duplicaciones de periodo y dos bifurcaciones tangentes de carácter passing, para luego hacerse inestable en una nueva bifurcación splitting.

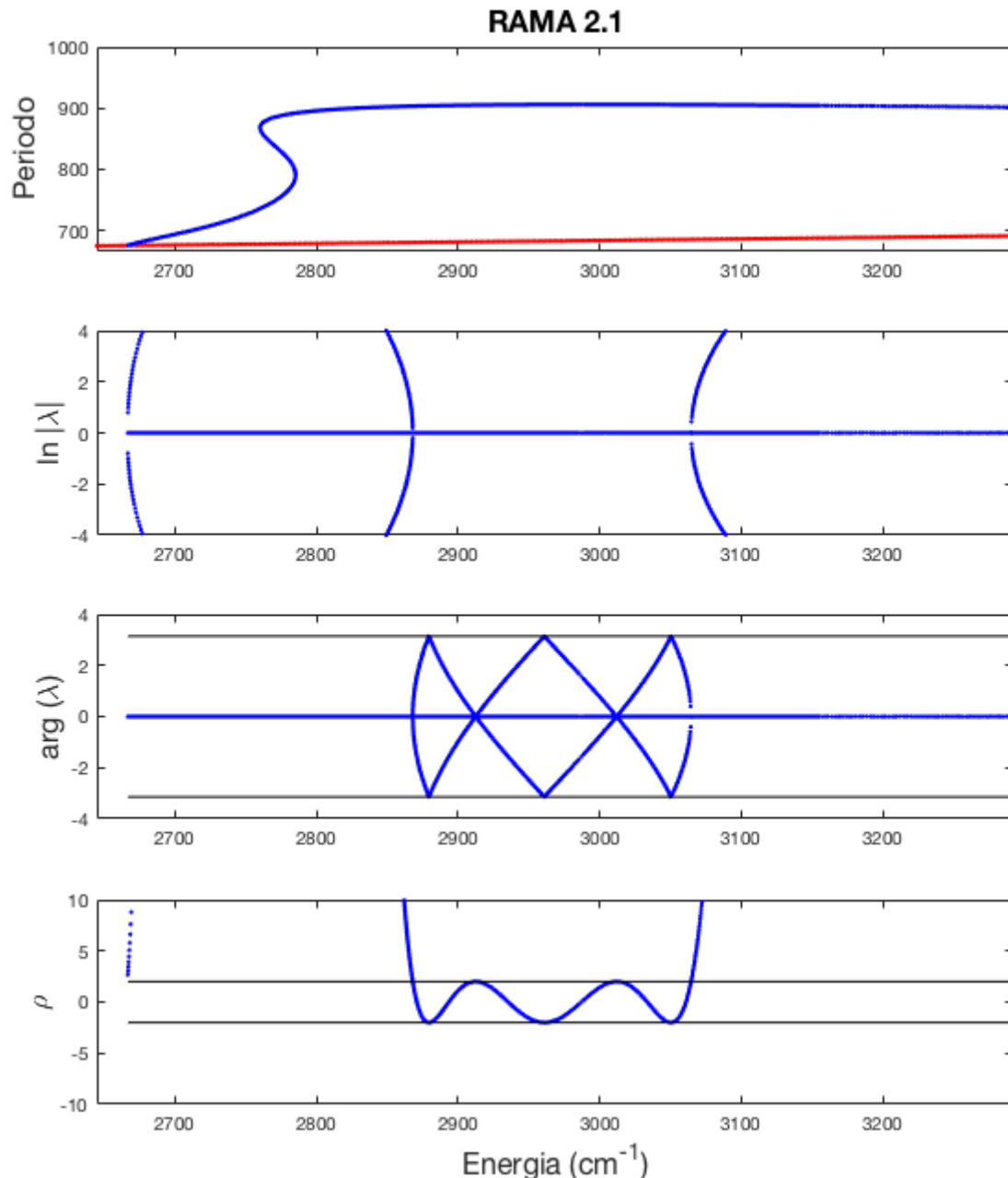


Figura 7.8: Rama 2.1 (azul) ampliada de la Figura 7.7. De arriba a abajo, se aprecian las gráficas del periodo, el logaritmo del módulo de los multiplicadores, el argumento de los multiplicadores y el índice de estabilidad en función de la energía. Señalados en negro los valores $\pm\pi$ en el argumento y ± 2 en el índice.

7.1.5. Rama 3

La Rama 3 (morado) se corresponde con la rama de periodo corto que nace del equilibrio (Figura 7.9). Se puede apreciar a través de los multiplicadores y del índice de estabilidad que esta rama nace estable y que la estabilidad se pierde en una bifurcación splitting de duplicación de periodo. Esta inestabilidad perdura durante el resto de la continuación, y por el momento no se han encontrado nuevas ramas adyacentes. La bifurcación splitting de esta rama coincide con la bifurcación splitting de la Rama 2 (roja), en la que nace la Rama 2.1 (azul).

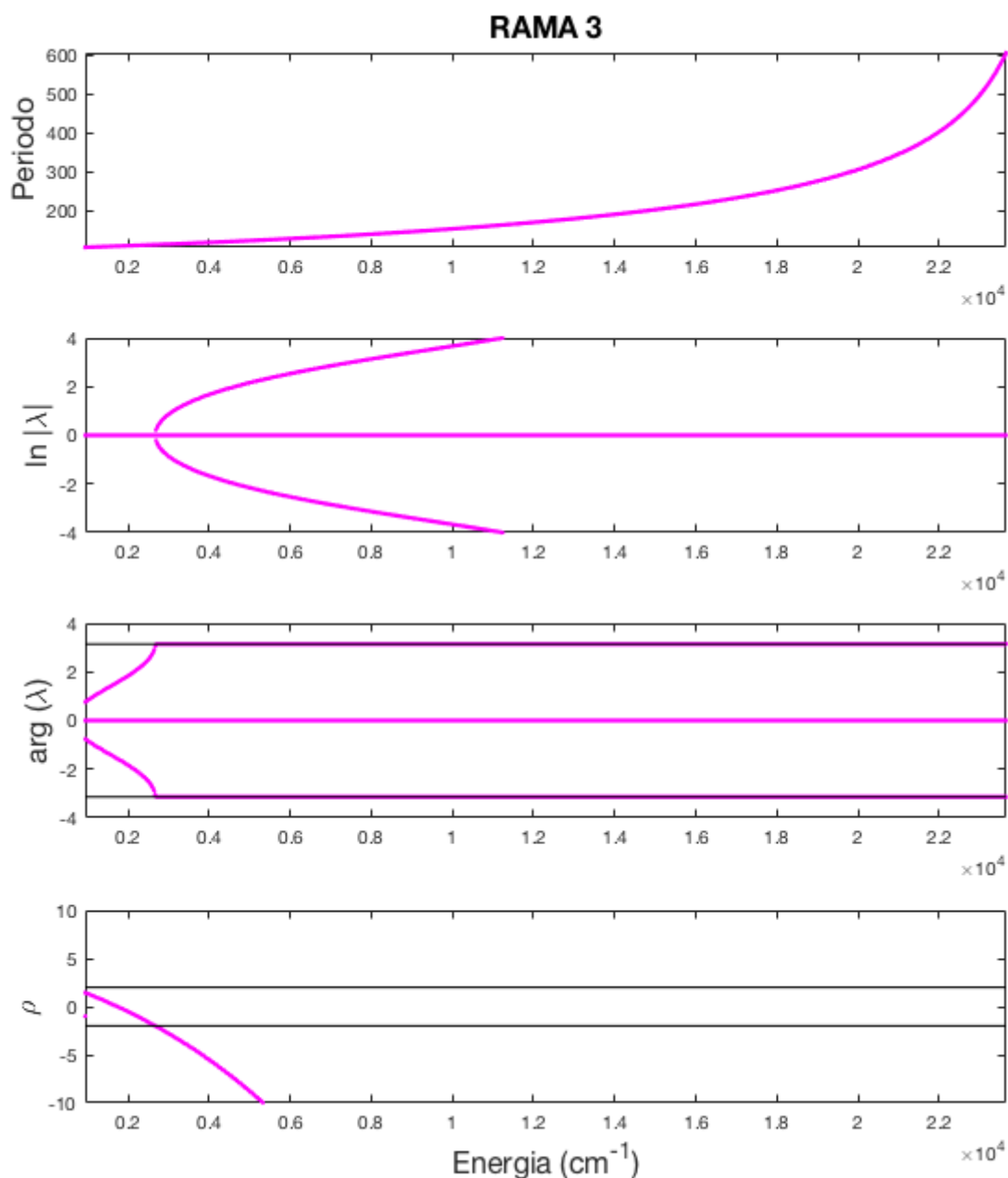


Figura 7.9: Resultados para la Rama 3 (morado) del diagrama de continuación-bifurcación de la molécula KCN de la Figura 7.1. De arriba a abajo, se aprecian las gráficas del periodo, el logaritmo del módulo de los multiplicadores, el argumento de los multiplicadores y el índice de estabilidad en función de la energía. Señalados en negro los valores $\pm\pi$ en el argumento y ± 2 en el índice.

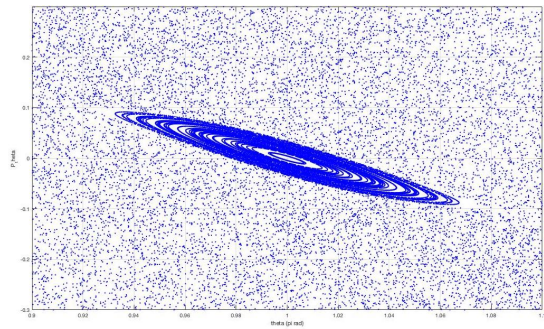
7.2. Visualización del espacio de fases con la sección de Poincaré

En este apartado, de forma complementaria a los resultados de continuación, se presentan una serie de secciones de Poincaré en la Figura 7.10, que se obtuvieron a la par que los resultados de continuación de AUTO, para disponer de un retrato global de la dinámica del sistema. Se han programado en MATLAB y se han ejecutado solo para unas cuantas energías, las suficientes para apreciar la estructura KAM y las resonancias sub-armónicas más dominantes.

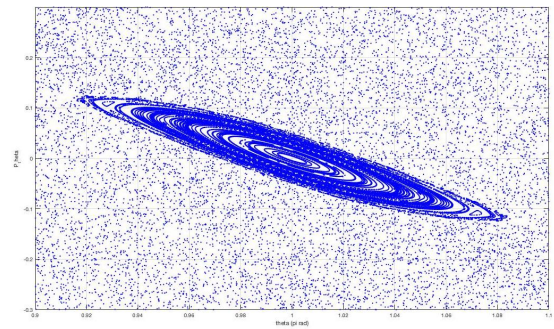
En la Figura 7.10 se comprueba la estructura descrita en la Sección 2.2 para un sistema no integrable, y que se esquematizó en la Figura 2.1. La región de orden está formada por órbitas periódicas (puntos) y por órbitas cuasiperiódicas (curvas invariantes). Los toros invariantes sobre los que descansan no son perfectamente circulares, sino que están deformados, como predice la teoría KAM. Fuera de esta región ordenada, se aprecia como los puntos de corte siguen un patrón aparentemente estocástico, por lo que son órbitas caóticas.

En la Figura 7.11 se han ampliado las secciones de Poincaré, con la consecuente pérdida de resolución, debido a limitaciones en la capacidad de computación. Se pretende observar las resonancias sub-armónicas de la órbita periódica central. Como se han identificado previamente en [13] y las secciones que estos autores presentan están cualitativamente relacionadas con las de la Figura 7.10, nos permite destacar las siguientes resonancias en nuestras secciones de Poincaré:

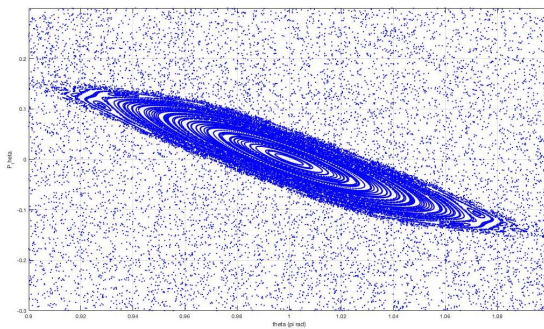
- Una resonancia 1:6 entre las Figuras 7.11c y 7.11d. En Figura 7.11e se observa que se separan de la región estable en forma de islas de estabilidad sobre el mar caótico, y en la Figura 7.11f su próxima desaparición, en la que las órbitas pasan a ser caóticas.
- Una resonancia 1:4 entre las Figuras 7.11f y 7.11g. Se aprecia en la Figura 7.11h cómo se separan formando islas de estabilidad. No se ha llegado a ver la destrucción.
- En la Figura 7.11g se observan 3 toros que corresponden a una resonancia 1:10. Los otros 2 que se faltan están completamente deformados y son imposibles de apreciar en las imágenes. La resonancia queda completamente destruida en la Figura 7.11h.
- En la Figura 7.11c se aprecia una resonancia 1:8, que corresponde con los 2 toros más grandes. Los otros 2 que faltarían por ver son imposibles de apreciar en la imagen. Es una resonancia muy efímera, debido a que en la Figura 7.11b no ha aparecido aún y en la Figura 7.11d ya ha sido destruída.



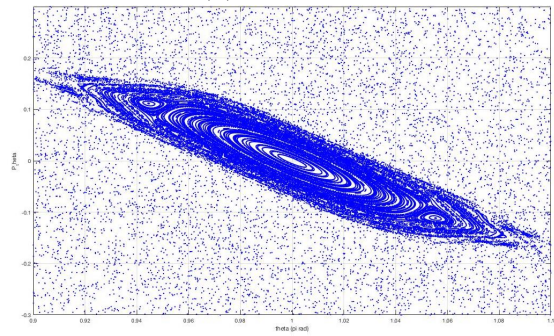
(a) 1686 cm^{-1}



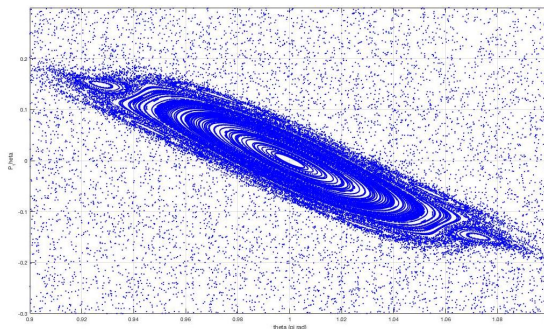
(b) 1870 cm^{-1}



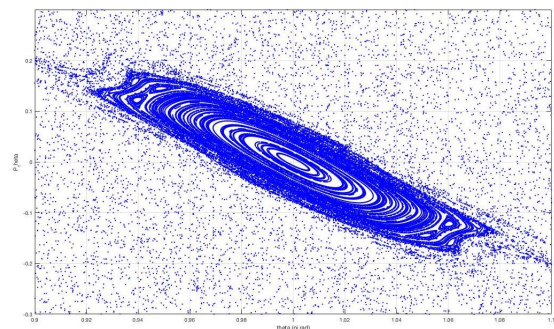
(c) 2051 cm^{-1}



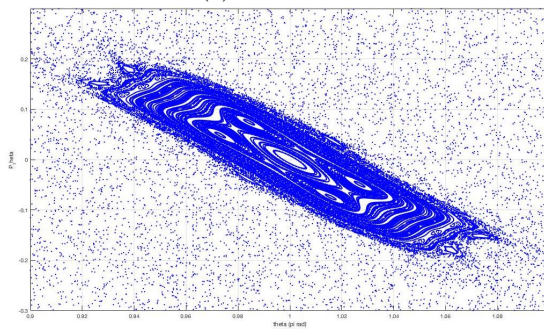
(d) 2236 cm^{-1}



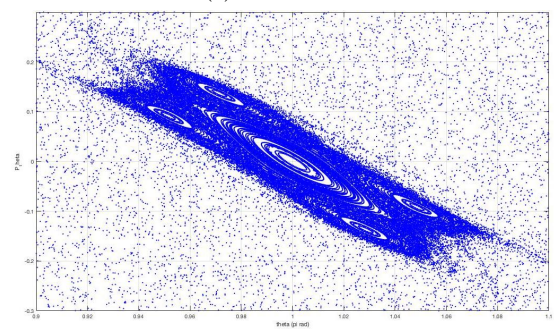
(e) 2420 cm^{-1}



(f) 2603 cm^{-1}



(g) 2786 cm^{-1}



(h) 2970 cm^{-1}

Figura 7.10: Secciones de Poincaré obtenidas mediante MATLAB para varias energías en el sistema KCN, donde se dibuja P_θ (en u.a.) frente a θ (en π rad). Son las intersecciones de las trayectorias con el plano $R_{eq}(\theta)$.

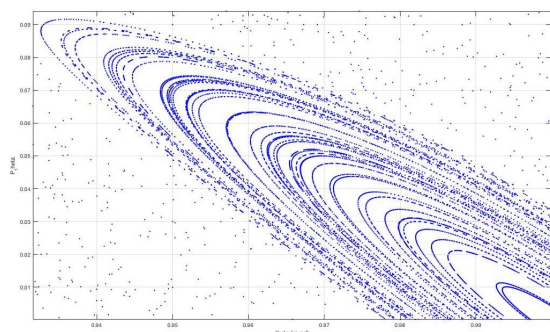
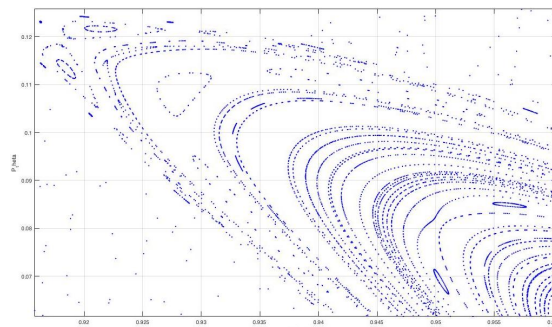
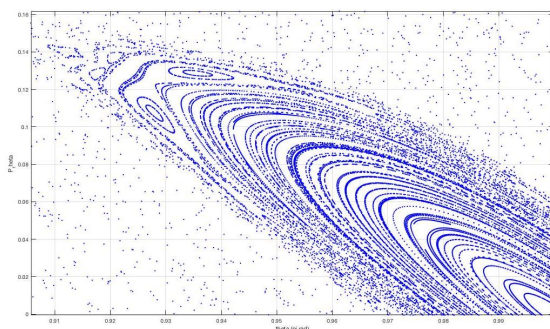
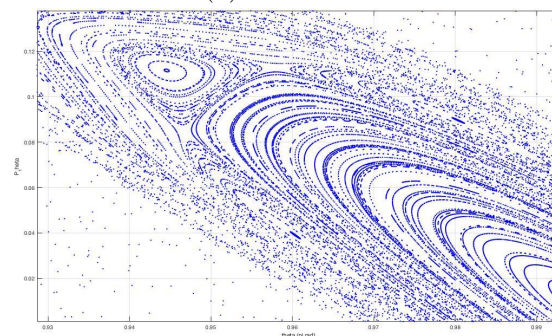
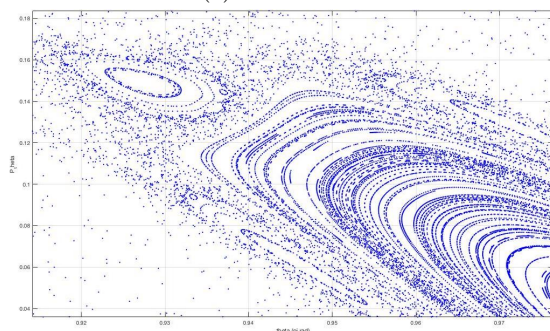
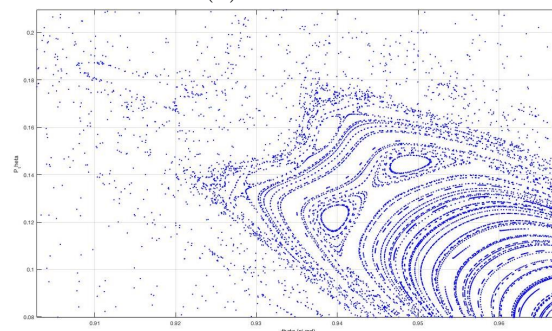
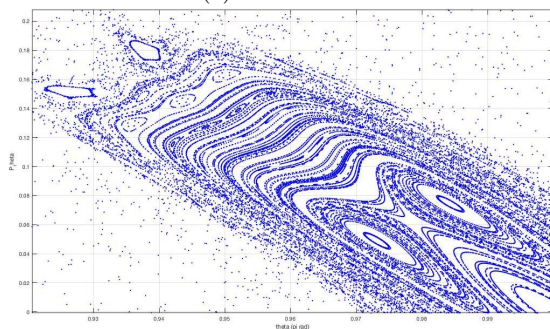
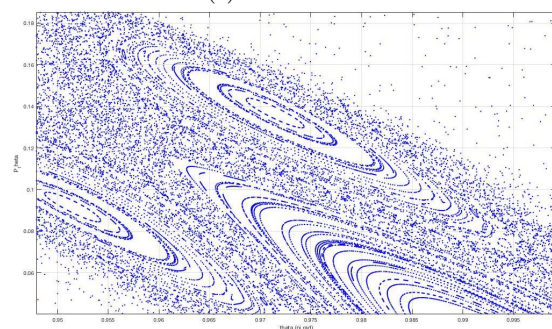
(a) 1686 cm^{-1} (b) 1870 cm^{-1} (c) 2051 cm^{-1} (d) 2236 cm^{-1} (e) 2420 cm^{-1} (f) 2603 cm^{-1} (g) 2786 cm^{-1} (h) 2970 cm^{-1}

Figura 7.11: Secciones de Poincaré de la Figura 7.10 de forma ampliada. Se ha hecho zoom en las regiones con interés para apreciar una serie de resonancias, en la medida de lo posible, debido a su baja resolución. Se dibuja P_θ (en u.a.) frente a θ (en π rad).

7.3. Discusión de resultados

Los multiplicadores de Floquet son un indicador que complementan la información sobre la estructura del espacio de fases que se observa en la sección de Poincaré en el estudio de la estabilidad de órbitas periódicas en sistemas dinámicos. Permiten caracterizar las bifurcaciones de las soluciones periódicas. Con el diagrama de bifurcaciones, además, se aportan de forma precisa los valores de los parámetros en los que éstas suceden, así como el periodo de la órbita periódica central.

A través del software AUTO, se ha podido encontrar una serie de bifurcaciones de ramas de soluciones periódicas para la solución inicial de la configuración lineal CN-K, correspondiente a $\theta = \pi$ y que se trata de una órbita periódica, del sistema KCN. Se ha podido comprobar todo lo predicho por la teoría de la estabilidad de órbitas periódicas en sistemas hamiltonianos:

- En todo momento los multiplicadores de Floquet son simétricos, en sentido de inversión, respecto del círculo unidad y del eje real.
- En todo el rango de energía siempre hay dos multiplicadores de Floquet de valor 1 real, triviales, que se pueden comprobar en las líneas $\ln |\lambda| = 0$ y $\arg(\lambda) = 0$ que se aprecian en todas las figuras de las ramas.
- En las regiones estables los multiplicadores no triviales son pares complejos conjugados, se mueven por el círculo unidad en el plano complejo tal que $\ln |\lambda| = 0$ y $|\rho| \leq 2$, y $\arg(\lambda) \in [-\pi, \pi]$ con $\arg(\lambda) = -\arg(\lambda^*)$.
- En las regiones inestables hay dos multiplicadores que abandonan el círculo unidad como pares recíprocos reales $(\lambda, 1/\lambda)$, con $\ln |\lambda| \neq 0$ y $\ln |\lambda| = -\ln |1/\lambda|$.
- En las bifurcaciones de doble 1 se observa que $\rho = 2$, $\arg(\lambda) = 0$ y $\ln |\lambda| = 0$. Como $\arg(\lambda) = 0$, los multiplicadores no triviales toman el valor 1 real. En las bifurcaciones splitting, de inestable a estable, los multiplicadores que se encontraban como par recíproco real $(\lambda, 1/\lambda)$ en el eje real positivo pasan al círculo unidad, y viceversa, al pasar de estable a inestable los multiplicadores abandonan de esta forma el círculo unidad y el índice de estabilidad se hace $\rho > 2$.
- En las bifurcaciones de tipo duplicación de periodo, se observa que $\rho = -2$, $\arg(\lambda) = \pi$ y $\ln |\lambda| = 0$. Como $\arg(\lambda) = \pi$, los multiplicadores no triviales toman el valor -1 real. En las bifurcaciones splitting, de inestable a estable los multiplicadores que se encontraban como par recíproco real $(\lambda, 1/\lambda)$ en el eje real negativo pasan al círculo unidad, y viceversa, en el cambio de estable a inestable los multiplicadores abandonan de esta forma el círculo unidad y el índice de estabilidad se hace $\rho < -2$.
- En las bifurcaciones passing, tanto de doble 1 como duplicación de periodo, los multiplicadores continúan dando vueltas por el círculo unidad, con $|\rho| \leq 2$

Una relación directa con los resultados obtenidos se encuentra en el estudio por continuación numérica del péndulo-muelle, realizada por Galan-Vioque et al. [9]. Se resumen en la Figura 7.12. Puede observarse como en la Rama 3 (morado), en la Figura 7.9, los multiplicadores de Floquet tienen el mismo comportamiento que en el péndulo muelle: tras la aparición de una solución periódica estable a partir del punto de equilibrio, al aumentar la energía se da una bifurcación splitting, con duplicación de periodo, y se trata de una resonancia 1:2. Como el sistema que se ha estudiado tiene una mayor riqueza de términos no lineales, se han encontrado nuevas ramas de soluciones periódicas, en este caso, las que se han denotado por Rama 1 (verde), Rama 2 (roja), y Rama 2.1 (azul).

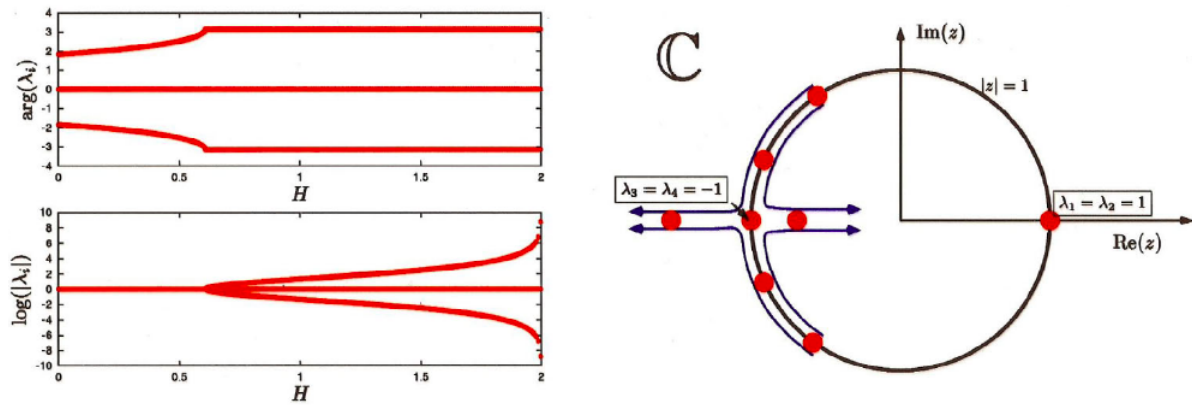


Figura 7.12: Resultados de continuación del péndulo muelle de Galan-Vioque et al. [9]. A la derecha, el comportamiento de los multiplicadores de Floquet, análogos a los de la Rama 3 (morada) en la Figura 7.9. A la derecha, se aprecia el comportamiento de los multiplicadores de Floquet sobre el círculo unidad, tanto el autovalor de valor 1 doble como los otros dos no triviales, que al llegar a $(-1,0)$ ocurre la bifurcación splitting de duplicación de periodo, y éstos salen del círculo unidad como pares reales recíprocos que se alejan del punto crítico con simetría de inversión sobre el semieje negativo real. Tomada de [9].

En el trabajo de Borondo et al. [13] se encontró que las resonancias que producen un cambio más significativo en el espacio de fases son la 1:4 y la 1:2, y en ningún momento en su estudio hacen referencia a resonancias 1:3. Este resultado se debe a la simetría de inversión $\theta \rightarrow -\theta$, según se obtiene para el péndulo-muelle de forma teórica por Verlhust et al. [10]. En la Figura 7.13 se observa la aparición de la resonancia 1:2 en el sistema KCN, en la que la órbita que pasa por $\theta = \pi$ en la sección de Poincaré deja de ser estable a través de una bifurcación splitting de duplicación de periodo. Sin embargo, a pesar de que la estabilidad se pierde con una bifurcación de duplicación de periodo, la energía a la que sucede según [13] se encuentra entre $4200 - 4300 \text{ cm}^{-1}$, y no se corresponde con la que ocurre en la Rama 3, a 2688 cm^{-1} . En las condiciones actuales, no somos capaces de relacionar las secciones de Poincaré directamente con los multiplicadores de Floquet. Encontrar esta relación es el punto de partida para una investigación posterior.

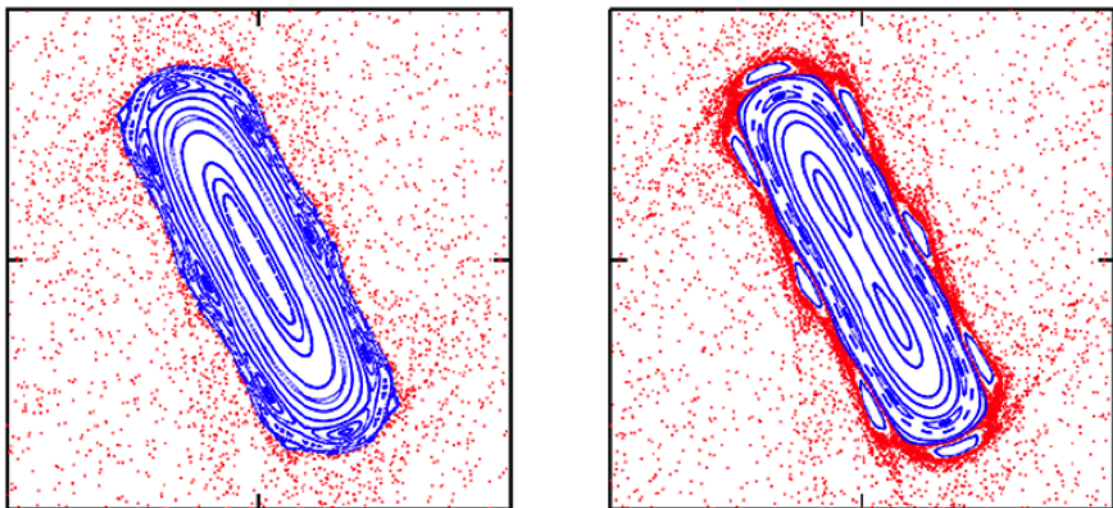


Figura 7.13: Secciones de Poincaré en el sistema molecular KCN para 4200 cm^{-1} y 4300 cm^{-1} , izquierda y derecha, respectivamente. Se dibuja P_θ (en u.a.) frente a θ (en π rad), el plano de corte es $R_{eq}(\theta)$. Se observa una resonancia 1:2 a través de una bifurcación de periodo doble con cambio de estabilidad. La órbita periódica central pasa de estable a inestable. Además, se observa claramente como una resonancia 1:12 de la región ordenada se separan formando islas de estabilidad en el mar caótico. Tomada de [13].

Capítulo 8

Conclusiones y posibles ampliaciones

El objetivo de este trabajo se ha centrado en el estudio por continuación numérica de la estabilidad de un sistema dinámico hamiltoniano con interés químico, la molécula KCN. Debido a la compleja estructura del espacio de fases que presenta como consecuencia de su potencial altamente no lineal, el problema adquiere interés matemático.

En primer lugar, se ha proporcionado una síntesis amplia del estudio de la estabilidad de órbitas periódicas a través de los multiplicadores de Floquet, y de la sección de Poincaré, como herramientas complementarias. Para sistemas dinámicos autónomos una órbita T -periódica tiene un multiplicador con valor 1 real. La forma de los multiplicadores se ha particularizado para sistemas hamiltonianos, en los que aparecen agrupados en 4-uplas con simetría de inversión respecto al círculo unidad y al eje real en el plano complejo, como consecuencia de la estructura simpléctica (resultado que también se obtiene de la propiedad de invariancia frente a la inversión temporal). Por tanto, las órbitas periódicas en sistemas hamiltonianos siempre tienen un autovalor doble con valor 1, y son estables cuando todos los multiplicadores se encuentran sobre el círculo unidad, formando pares complejos conjugados. Cuando las soluciones son inestables los autovalores se encuentran fuera del círculo unidad como pares reales recíprocos. Debido a la conservación de la energía, en estos sistemas no se dan órbitas asintóticamente estables.

En segundo lugar, la continuación numérica es una herramienta muy potente para el estudio de los sistemas dinámicos. Su base teórica se sustenta sobre el Teorema de la Contracción y el Teorema de la Función Implícita. Con el software AUTO, que emplea el método de continuación de pseudo-longitud de arco de Keller, se puede encontrar el diagrama de bifurcaciones, así como el valor de los multiplicadores de Floquet para las familias de soluciones periódicas que emanan de un punto de equilibrio. Debido a que AUTO no está preparado con un módulo específico para sistemas hamiltonianos, es preciso emplear sus capacidades de forma indirecta para este tipo de sistemas, según el método de Freire et al. [7]. La continuación numérica con AUTO se ha realizado sobre un modelo de la molécula KCN con 2 grados de libertad. Su estructura del espacio de fases se conoce de forma muy detallada a través de la sección de Poincaré por el trabajo realizado por Borondo et al. [13]. El estudio complementario a partir de los multiplicadores de Floquet se ha iniciado con este trabajo y es su principal aportación.

En tercer lugar, los resultados de la continuación han arrojado una serie de ramas de soluciones periódicas de gran riqueza, pudiéndose observar bifurcaciones de doble 1 y de duplicación de periodo, tanto *passing* como *splitting*. Se ha encontrado que la molécula KCN presenta una analogía con un sistema mecánico clásico, el péndulo-muelle, al que lleva implícito dentro del potencial. En el comportamiento de los multiplicadores de Floquet se ha observado que una de las ramas de soluciones periódicas de la molécula KCN tiene la misma forma que la rama de soluciones del péndulo-muelle hallada por Galán-Vioque et al. [9]. En esta familia la estabilidad se pierde mediante una bifurcación *splitting* de duplicación de periodo, que es lo mismo que le

ocurre a la órbita periódica estudiada por Borondo et al. [13], sin embargo, se ha encontrado que suceden a energías diferentes, por lo que no se pueden relacionar directamente. Éste es el punto de partida para continuar nuestra investigación, pudiéndose derivar las siguientes propuestas de líneas trabajo:

- Completar el diagrama de bifurcaciones encontrando nuevas ramas de soluciones periódicas, mediante el software AUTO. Un diagrama más completo arrojaría luz sobre la relación entre los multiplicadores de Floquet y las secciones de Poincaré.
- Búsqueda y análisis de otro tipo de bifurcaciones en este sistema diferentes a las estudiadas, partiendo de las que aparecen en el péndulo-muelle, como las bifurcaciones banana o anti-banana.
- Estudiar de forma teórica los teoremas de Krein y Moser y aplicarlos a este problema, para predecir cuando las bifurcaciones de doble 1 o duplicaciones de periodo serán passing o splitting.

Bibliografía

- [1] Kuznetsov, Y. A. (2013). *Elements of applied bifurcation theory* (Vol. 112). Springer Science and Business Media.
- [2] Strogatz, S. (2001). *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering (studies in nonlinearity)*.
- [3] Yakubovich, V. A. and Starzhinskii, V. M. (1975). *Linear Differential Equations with Periodic Coefficients, 1 and 2*, John Wiley, New York
- [4] Meyer K. R., Hall, G. R., and Offin D. (2009) *Introduction to Hamiltonian Dynamical Systems and the N-Body Problem* (Vol. 90). Applied Mathematical Sciences, Springer-Verlag
- [5] Lichtenberg, A. J., Lieberman, M. A. (2013). *Regular and chaotic dynamics* (Vol. 38). Springer Science and Business Media.
- [6] Galán-Vioque, J., Freire. E., Doedel E., et al. (2007). *Numerical continuation methods for dynamical systems*. Springer.
- [7] Freire, E., Munoz-Almaraz, F. J., Galán, J., Doedel, E., and Vanderbauwhede, A. (2003). Continuation of periodic orbits in conservative and Hamiltonian systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 181(1-2), 1-38.
- [8] Doedel, E. J., Paffenroth, R. C., Keller, H. B., Dichmann, D. J., Galán-Vioque, J., and Vanderbauwhede, A. (2003). Computation of periodic solutions of conservative systems with application to the 3-body problem. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 13(06), 1353-1381.
- [9] Galan-Vioque, J., Almaraz, F. J. M., and Macías, E. F. (2014). Continuation of periodic orbits in symmetric Hamiltonian and conservative systems. *The European Physical Journal Special Topics*, 223(13), 2705-2722.
- [10] Verhulst, F., and Tuwankotta, J. M. (2001). Symmetry and resonance in Hamiltonian systems. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 61(4), 1369-1385.
- [11] Forest, M. G., Zhou, R., and Wang, Q. (2004). Chaotic Boundaries of Nematic Polymers in Mixed Shear and ExtensionalFlows. *Physical Review Letters*, 93(8), 088301.
- [12] Reichert, C., Starke, J., and Eiswirth, M. (2001). Stochastic model of CO oxidation on platinum surfaces and deterministic limit. *The Journal of Chemical Physics*, 115(10), 4829-4838.
- [13] Párraga, H., Arranz, F. J., Benito, R. M., and Borondo, F. (2018). Above saddle-point regions of order in a sea of chaos in the vibrational dynamics of KCN. *The Journal of Physical Chemistry A*, 122(13), 3433-3441.
- [14] Párraga, H., Arranz, F. J., Benito, R. M., and Borondo, F. (2013). Ab initio potential energy surface for the highly nonlinear dynamics of the KCN molecule. *The Journal of chemical physics*, 139(19), 194304.

- [15] Revuelta, F., Vergini, E., Benito, R. M., and Borondo, F. (2017). Semiclassical basis sets for the computation of molecular vibrational states. *The Journal of chemical physics*, 146(1), 014107.
- [16] Benito, R. M., Borondo, F., Kim, J. H., Sumpter, B. G., and Ezra, G. S. (1989). Comparison of classical and quantum phase space structure of nonrigid molecules, LiCN. *Chemical physics letters*, 161(1), 60-66.
- [17] Borondo, F., Zembekov, A. A., and Benito, R. M. (1996). Saddle-node bifurcations in the LiNC/LiCN molecular system: Classical aspects and quantum manifestations. *The Journal of chemical physics*, 105(12), 5068-5081.
- [18] Benitez, P., Losada, J. C., Benito, R. M., and Borondo, F. (2015). Using the small alignment index chaos indicator to characterize the vibrational dynamics of a molecular system: LiNC-LiCN. *Physical Review E*, 92(4), 042918.
- [19] Benítez Gamero, P. (2018). Caracterización de la estructura del espacio de fases de sistemas hamiltonianos mediante indicadores dinámicos (Tesis Doctoral).
- [20] Farantos, S. (2014). *Nonlinear Hamiltonian Mechanics Applied to Molecular Dynamics*. Springer, London.
- [21] Iñarrea, M., Palacián, J. F., Pascual, A. I., and Salas, J. P. (2011). Bifurcations of dividing surfaces in chemical reactions. *The Journal of chemical physics*, 135(1), 014110.
- [22] Tricoche, X., Garth, C., Sanderson, A. (2011). Visualization of topological structures in area-preserving maps. *IEEE transactions on visualization and computer graphics*, 17(12), 1765-1774.
- [23] Hadjedemetriou, J. D. (2006). Periodic orbits in gravitational systems. In *Chaotic Worlds: from Order to Disorder in Gravitational N-Body Dynamical Systems* (pp. 43-79). Springer, Dordrecht.
- [24] Farkas, M. (2013). *Periodic motions* (Vol. 104). Springer Science and Business Media.
- [25] Goldstein, H. (2015). *Mecánica clásica*. Reverté.
- [26] Gantmacher, F. R. (1960). *Analytical Mechanics*. Moscow: Gosud, 80-100.
- [27] Arnol'd, V. I. (2013). *Mathematical methods of classical mechanics* (Vol. 60). Springer Science and Business Media.
- [28] Jorba, A., and Villanueva, J. (1997). On the persistence of lower dimensional invariant tori under quasi-periodic perturbations. *Journal of Nonlinear Science*, 7(5), 427-473.
- [29] Michel, A. N. (1999). *Recent trends in the stability analysis of hybrid dynamical systems*. *IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Fundamental Theory and Applications*, 46(1), 120-134.
- [30] Vanderbauwhede, A. (1992). Branching of periodic solutions in time-reversible systems. In H. Broer and F. Takens (Eds.), *Pitman Research Notes in Mathematics* (Vol. 222, pp. 97-113). Burnt Mill, UK: Longman Scientific and Technical.
- [31] Broucke, R. (1969). Stability of periodic orbits in the elliptic, restricted three-body problem. *AIAA journal*, 7(6), 1003-1009.
- [32] Howard, J. E., and MacKay, R. S. (1987). Linear stability of symplectic maps. *Journal of mathematical physics*, 28(5), 1036-1051.

- [33] Fairgrieve, T. F., and Jepson, A. D. (1991). OK Floquet multipliers. *SIAM journal on numerical analysis*, 28(5), 1446-1462.
- [34] Henrard, J. (1973). Lyapunov's center theorem for resonant equilibrium. *Journal of Differential Equations*, 14(3), 431-441.
- [35] Doedel, E. J., Champneys, A. R., Dercole, F., Fairgrieve, T. F., Kuznetsov, Y. A., Oldeman, B., ... and Zhang, C. H. (2007). *AUTO-07P: Continuation and bifurcation software for ordinary differential equations*.